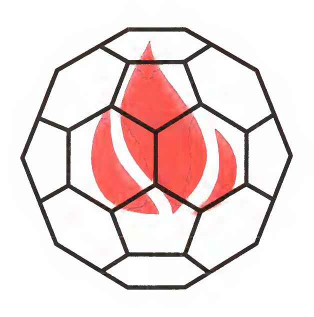
РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
УДМУРТСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР

ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ



Том 7, № 3

Ижевск – 2005

Журнал издается Удмуртским научным центром Уральского отделения Российской академии наук

Тематика журнала

1. **Процессы горения и взрыва.**
2. **Математическое моделирование физико-химических процессов.**
3. **Кластеры, кластерные системы и материалы.**
4. **Межфазные слои и процессы взаимодействия в них.**
5. **Квантово-химические расчёты.**
6. **Нелинейные кинетические явления.**
7. **Наноэлектронные приборы и устройства.**

ISSN 1727-0227 (Print), ISSN 1727-0529 (Online)



СОДЕРЖАНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА

В данном номере журнала опубликованы материалы 5 Международной конференции по внутрикамерным процессам и горению в установках на твердом топливе и ствольных системах (ICOC'2005), которая состоялась в период с 11 по 13 июля 2005 года.

Редколлегия журнала «Химическая физика и мезоскопия» от души поздравляет всех с наступающим 2006 годом!

Нашим читателям и авторам желаем творческих успехов и плодотворного взаимного сотрудничества.

МЕХАНИКА ДЕФОРМИРУЕМОГО ТВЕРДОГО ТЕЛА (ЗАРЯДЫ И ЭЛЕМЕНТЫ КОНСТРУКЦИИ ТЕХНИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВ)

УДК539.3:621.454.3

НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ ЗАРЯДОВ РДТТ В ОБЛАСТИ ДОННОГО ТОРЦА

В.А. ДУНАЕВ, А.А. КАШИРКИН, О.А. ЕВЛАНОВА

ГНПП «Сплав», Тула, Россия

АННОТАЦИЯ. Разработана комплексная математическая модель, содержащая модели одномерного квазистационарного течения, двумерного течения газов в области торцов заряда и напряженно-деформированное состояние заряда. На основе данной модели проведен анализ движения потоков продуктов сгорания в области у переднего днища и напряженно-деформированного состояния донного торца заряда.

На функционирование РДТТ с зарядами из топлива с низкими значениями механических характеристик значительное влияние оказывают деформации зарядов под действием полетных перегрузок, перепадов давления и газодинамических нагрузок. В ряде случаев, например при высоких начальных температурах зарядов, использовании зарядов большого относительного удлинения из низкомодульных топлив, нерациональных геометрических параметрах зарядов значительные локальные деформации зарядов и в первую очередь торцов зарядов могут являться причиной аномальной работы. Экспериментально установлено, что при нерациональном конструктивном оформлении РДТТ с высоким объемным заполнением в области переднего дна РДТТ, неэффективной схеме воспламенения существует вероятность перекрытия осевого канала заряда и отрыва донной манжеты от корпуса, что требует прогнозирования НДС зарядов в области переднего торца.

Определение взаимодействия между потоком продуктов сгорания и внутренней поверхностью конструкции требует расчета указанных процессов в нестационарной постановке. Для рассматриваемых объектов характерны такие особенности процессов, как значительные градиенты скорости и давления, наличие отрывных течений в сочетании со сложностью геометрии полостей, наличие до-, транс- и сверхзвуковых зон в области течения.

Для оценки ВБХ с учетом НДС зарядов разработана комплексная математическая модель, содержащая модели одномерного квазистационарного течения, двумерного те-

чения газов в области торцов зарядов, на основе которой рассчитано НДС зарядов в областях, прилегающих к предсопловому и межсекционному объемам [1,2]. В работе на основе данной методики проведен анализ движения потоков продуктов сгорания в области у переднего дна и НДС донного торца заряда.

Основу математической модели процессов нестационарного движения продуктов сгорания РДТТ составляют уравнения движения вязкого многокомпонентного газа.

Система уравнений имеет вид [3]:

- уравнение неразрывности

$$\rho \frac{\partial c_k}{\partial t} + \rho \vec{\mathbf{W}}\, grad\, c_k = J_k - div(\vec{m}_{Dk}), \ \sum_{k=1}^{N} c_k = 1; \quad \forall x_m \in V_O,\ t > 0; \qquad (1)$$

- уравнение количества движения

$$\rho \frac{d\vec{\mathbf{W}}}{dt} = -gradP + Div\,\sigma - \sum_k Div(\vec{m}_{Dk}\vec{W}_{Dk}), \ \ \forall x_m \in V_O,\ t > 0; \qquad (2)$$

- уравнение энергии

$$\rho \frac{dE}{dt} = -div(P\vec{\mathbf{W}}) + div(\sigma\vec{\mathbf{W}}) + div\,\vec{q}_T + \sum_k \rho c_k \vec{\mathbf{F}}_{\mathbf{k}} \cdot \vec{\mathbf{W}}_{Dk} + $$
$$+ \sum_k div(\sigma\vec{\mathbf{W}}_{Dk}) - \sum_l div(\rho c_k E_k \vec{\mathbf{W}}_{Dk}), \qquad \forall x_m \in V_O,\ t > 0; \qquad (3)$$

где V_O - объем области; t – время, $E = U + W^2/2$ - удельная полная энергия смеси, $U = c_v T$ - удельная внутренняя энергия, $\vec{\mathbf{W}}$ - вектор скорости потока в данной точке (среднемассовая скорость); P и T - местные термодинамическое давление и температура; x_m - пространственные координаты; ρ - плотность среды; $\vec{q}_T$ - вектор плотности теплового потока; k=1,2,3...N – индекс компонента смеси; N – число компонентов смеси; c_k - массовые концентрации k-х компонентов, определяющие состав среды; σ – тензор напряжений вязкости; $\vec{\mathbf{W}}_{Dk}$ - вектор скорости диффузии компонента k (вектор скорости компонента относительно потока: $\vec{\mathbf{W}}_{\mathbf{Dk}} = \vec{\mathbf{W}}_{\mathbf{k}} - \vec{\mathbf{W}}$, λ – коэффициент теплопроводности, c_v – удельная теплоемкость смеси, q_v – удельное выделение теплоты, отнесенное к единице массы, $\vec{m}_{Dk}$ – диффузионный поток массы k-ого компонента.

- уравнение состояния: $$P = \rho T \sum_{k=1}^{N} c_k R_k \, . \tag{4}$$

Для моделирования турбулентности используется стандартная двухпараметрическая модель, включающая уравнения для энергии турбулентности и скорости диссипации.

Для расчета рассматриваемых течений в каналах сложной формы, характерных для конструкций ЛА, использован модифицированный численный метод крупных частиц, реализованный на неравномерной сетке метода конечных элементов [4]. Введение указанной сетки объясняется необходимостью совместного моделирования процессов газодинамики и динамики деформирования заряда.

Напряженно-деформированное состояние элементов РДТТ моделируется в динамической постановке с учетом нестационарного нагружения конструкции силовым воздействием со стороны продуктов сгорания ТТ. Для получения уравнения деформирования использован принцип виртуальных работ [4]:

$$\int_w \sigma_{ij} \delta\varepsilon_{ij} dw = \int_w F_i \delta u_i dw + \int_s T_i \delta u_i dS - \int_w \rho a_i \delta u_i dw \, , \tag{6}$$

где w и s – объем и поверхность тела; σ_{ij}, ε_{ij} – компоненты тензоров напряжений и деформаций, u_i и a_i – компоненты векторов перемещений и ускорений, F_i и T_i – компоненты векторов объемных поверхностных сил, ρ – плотность материала.

В области упругости связь напряжений и деформаций выражается в виде $\{\sigma\} = [D^E] \cdot \{\varepsilon\}$, где $[D^E]$ - матрица упругих постоянных. В связи с тем, что рассматривается начальный период внутрибаллистического процесса, малый по продолжительности, для определения сил сопротивления, вызванных явлениями вязкости, использовалась зависимость:

$$S_{ij}^m = 2\mu(T, \varepsilon_{ij}, \dot{\varepsilon}_{ij})(\dot{\varepsilon}_{ij} - \delta_{ij}\dot{\varepsilon}_{ii}/3), \tag{7}$$

где $\mu(T, \varepsilon_{ij}, \dot{\varepsilon}_{ij})$ – коэффициент, учитывающий вязкость, δ_{ij} – символ Кронекера.

Для описания процесса динамики деформирования приращение полной деформации $d\varepsilon_{ij}$ представляется в виде суммы [5]

$$d\varepsilon_{ij} = d\varepsilon_{ij}^e + d\varepsilon_{ij}^m + \delta_{ij} d\varepsilon^T \, , \tag{8}$$

где δ_{ij} - символ Кронекера, ε^e – приращение упругой деформации, ε^m – приращение деформаций вследствие вязкости, ε^T – приращение температурной деформации.

Для численного решения уравнения деформирования применялась итерационная процедура метода дополнительных деформаций.

В соответствии с методом конечных элементов построена дискретная модель тела, состоящая из конечного числа связанных соответствующим образом в узловых точках конечных элементов. Для расчета как механической, так и газодинамической задач в осесимметричной постановке использовались единые гибридные элементы, состоящие из нескольких кольцевых треугольных конечных элементов с тремя узлами с линейной функцией распределения перемещений и температуры.

Глобальное разрешающее уравнение МКЭ для НДС имеет вид

$$[K]\{u\} = \{F\} - \{D\}^T\left\{\frac{\partial u}{\partial t}\right\} - \{M\}^T\left\{\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right\}, \qquad (9)$$

где $[K]$, $\{F\}$, $\{D\}^T$, $\{M\}^T$ – глобальные матрицы жесткости, узловых внешних сил, демпфирования и масс.

Дискретизация по времени при численном расчете динамического процесса деформирования осуществлена методом конечных разностей с применением неявной разностной схемы

$$([K] + \frac{1}{2\Delta t}[D] + \frac{1}{\Delta t^2}[M])\{u^{k+1}\} = \{F^k\} + \frac{1}{2\Delta t}\{D\}^T\{u^{k-1}\} + \frac{1}{\Delta t^2}\left(\{M\}^T(2\{u^k\} - \{u^{k-1}\}\right). \qquad (10)$$

По разработанным моделям создан алгоритм и программа численного моделирования рассматриваемых процессов. Для оценки справедливости предложенных соотношений и алгоритма вычислений было произведено решения ряда тестовых задач и доказана сходимость и устойчивость решений.

С использованием данной методики проведено решение задачи по оценке воздействия потока продуктов сгорания заряда воспламенительного устройства, размещенного в переднем днище, на донный торец заряда, оптимизации параметров заряда воспламенительного устройства и выбора рациональной конфигурации торца заряда.

На рис.1,2 представлена компьютерная визуализация полей давления и осевых напряжений в зоне донного торца заряда в начальный момент времени после срабатывания воспламенителя и графики радиальных перемещений точек, полученные при исследования взаимодействия продуктов сгорания воспламенителя РДТТ с торцом заряда.

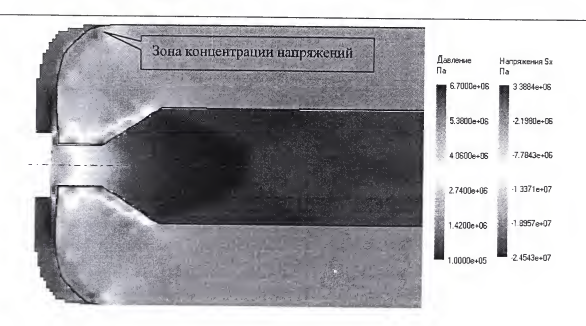


Рис.1. Компьютерная визуализация полей давления и осевых напряжений в зоне переднего торца заряда при срабатывании воспламенителя (время процесса t=0.004 мс)

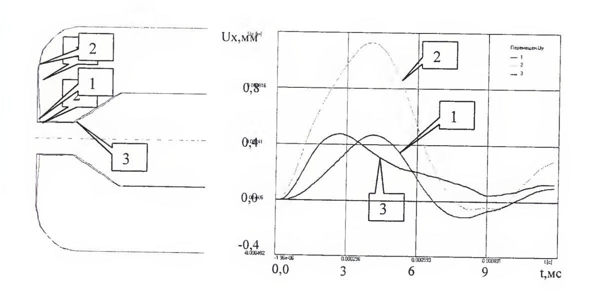


Рис.2. Деформирование переднего торца заряда при срабатывании воспламенителя (время процесса t=0.004 с) и графики радиальных перемещений точек 1-3 торца

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дунаев В.А., Каширкин А.А. Математическое моделирование напряженно-деформированного состояния заряда РДДТ//Труды Всероссийской НПК. – Санкт-Петербург: БГТУ.- 1999.
2. Каширкин А.А, Дунаев В.А. Особенности напряженно-деформированного состояния секционных зарядов твердого топлива//Оборонная техника.- 1999.- №11-12.
3. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. - М.: Наука, 1973.
4. Бригадиров Г.В., Дунаев В.А. Численное моделирование внутрибаллистических процессов в теплоэнергетических установках.//Труды 21-го международного пиротехнического семинара. - М.: АНРФ.- 1995.
5. Колтунов М.А. и др. Упругость и прочность цилиндрических тел. М., Высшая школа, 1975.

SUMMARY. Complex mathematical model containing models of one-dimensional quasisteady flow, two-dimensional flow at charge-end and mode of deformation of charge is proposed. On basis of this model an analysis of combustion materials flow and mode of deformation of charge-end is done.

УДК 621.454.3

БАЛЛИСТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АКТИВНО-РЕАКТИВНЫХ СНАРЯДОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ И НАДЕЖНОСТЬ ИХ МАРШЕВЫХ РАКЕТНЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ

Д.П.АЛЕКСАНДРОВ, В.Ф. ЗАХАРЕНКОВ*

СПбГПУ, Санкт-Петербург, Россия
* БГТУ " ВОЕНМЕХ", Санкт-Петербург, Россия

АННОТАЦИЯ. Изложен машинный эксперимент по изучению влияния механических характеристик твердого топлива и материалов корпусов маршевых ракетных двигателей на твердом топливе (РДТТ) при замене металлических корпусов на стеклопластиковые и боралюмоуглепластиковые на боевую эффективность активно-реактивных снарядов (АРС) и надежность их функционирования. Даны статистический анализ работоспособности РДТТ и рекомендации по повышению технических характеристик изделий.

Активно-реактивный снаряд (АРС) как техногенная система по принципу действия представляет собой систему, в которой сначала имеет место активное движение снаряда и затем - активно-реактивное (рис. 1).

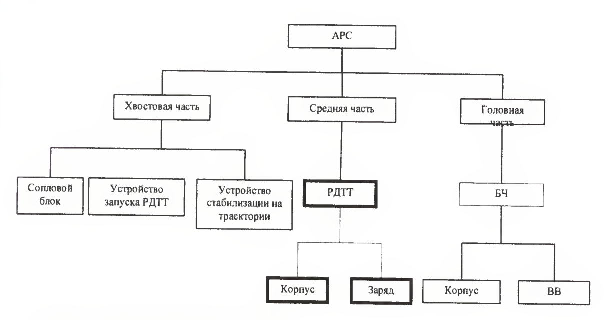


Рис. 1. Декомпозиция системы АРС

Информационные данные о процессе отработки АРС калибра 152 и 202 мм с металлическими корпусами свидетельствуют о наличии 3-5% отказов при проведении натурных испытаний, проявляющихся в виде уменьшения дальности полета снаряда на 10-12% или повреждений корпуса двигателя при движении на активном участке траектории.

Анализ многоуровневой иерархической системы АРС (рис.1), показывает, что основная причина указанных отказов – потеря работоспособности его командного элемента – маршевого ракетного двигателя на твердом топливе (РДТТ).

В процессе эксплуатации конструкция РДТТ испытывает динамические нагрузки как система с распределенными массами, обладающая реологическими деформационными и прочностными характеристиками. При этом экстремальные нагрузки возникают при переходных режимах работы: стартовых перегрузках в период активного движения АРС, воспламенении твердого топлива (ТТ), выходе РДТТ на режим и т.п., т.е. в периоды когда порядок эксплуатационных нагрузок определяется силами инерции. Колебательные процессы в двигателе, о чем свидетельствуют исследования внутрикамерных (внутри корпуса РДТТ) явлений, изменяют характер физических процессов горения ТТ.

Таким образом, можно предполагать, что потеря работоспособности двигателя связана с механической повреждаемостью, накапливаемой в его элементах при переходных режимах эксплуатации и обусловлена динамическим характером нагружения.

Механические повреждения в заряде ТТ приводят к аномалии его горения и, как следствие, к изменению вектора тяги, времени работы РДТТ и дальности полета АРС, а также к изменению характера физических процессов, приводящих к детонации топлива и разрушению корпуса АРС.

Правомерность сделанных предположений подтверждается анализом прочности РДТТ при переходных режимах эксплуатации, а именно, на периоде активного движения АРС, где имеют место указанные отказы[1].На рис. 2 представлены конструктивные схемы АРС калибра 152 и 202мм.

Для указанных типов снарядов было выполнено исследование влияния механических характеристик ТТ и материалов корпусов АРС на прочность РДТТ [2], эксплуатационную надежность и боевую эффективность АРС. Оценка последних проводилась по дальности метания и дульной скорости, получаемых при использовании штатного "вышибного" заряда (без учета работы РДТТ). При этом определялась вероятность безотказной работы РДТТ $p(\sigma^{(m)}{}_{i\max} \leq [\sigma]^{(m)}{}_c)$, где $\sigma^{(m)}{}_{i\max} \leq [\sigma]^{(m)}{}_c$ – условие работоспособности двигателя; $\sigma^{(m)}{}_{i\max}$ – максимальная интенсивность динамических напряжений в заряде ТТ; $[\sigma]^{(m)}{}_c$ – допускаемое напряжение при сжатии ТТ.

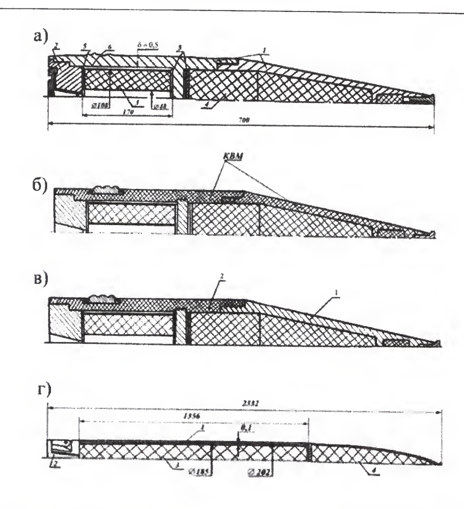


Рис. 2. Конструктивные схемы и варианты исполнения корпусов АРС калибра 152мм (а ,б ,в) и 202мм (г)

а – АРС со стальным корпусом: 1-корпус, 2- сопловой блок, 3-ракетный двигатель, 4 -боевая часть, 5,6-прокладки;б –АРС с корпусом из композицинно-волокнистого материала (КВМ); в – АРС с составным по длине корпусом: 1-металл , 2-КВМ; г – калибр 202 мм:1 -корпус, 2- сопловой блок, 3-ракетный двигатель,4-боевая

В качестве материалов корпусов рассматривались сталь, стеклопластик и боралюмоуглепластик (табл.1). Критерием выбора КВМ для изготовления корпуса служила длина снаряда: 4,6 калибра у 152мм АРС и 11,5 калибра у 202мм АРС. При этом для изготовления корпусов АРС калибра 152мм рассматривалось применение стеклопластика продольно-поперечного армирования (ППН 1:1) на основе волокна ВМ-1 и связующего ЭХД, технологичного и сравнительно недорогого в изготовлении, имеющего достаточно высокие удельную прочность и жесткость.

Таблица 1. Механические характеристики материалов корпуса и двигателя АРС

Материал		Сталь	Твердое топливо		Стекло пластик ППН 1:1	Боралюмо-углепла-стик ППН 1:2
			АРС 152мм	АРС 202мм		
Модуль нормальной упругости E, $\times 10^{-2}$ МПа	E_θ	2108	6,25	3,16	450	910
	E_r				220	
	E_x				215	420
Коэффициент Пуассонаμ	$\mu_{r\theta}$	0,31	0,47	0,49	0,24	0,16
	$\mu_{\theta r}$				0,21	0,16
	$\mu_{x\theta}$				0,22	0,14
	$\mu_{\theta x}$				0,16	018
	μ_{rx}				0,14	0,21
	μ_{xr}				0,13	0,21
Допускаемое напряжение $[\sigma]_c^p$, $\times 10^{-2}$ МПа	$[\sigma_\theta]_p$	5,7	0,25	0,19	145	9
	$[\sigma_r]_p$				7,65	6
	$[\sigma_x]_p$				4,5	4
Объемный весγ, кН/$м^3$	γ	78,2	16,2	17,5	18,5	21

Здесь E, μ – модуль нормальной упругости и коэффициент Пуассона, соответственно, изотропных материалов (корпуса, ТТ); $E_\theta, E_r, E_x, \mu_{r\theta}, \mu_{\theta r}, \mu_{x\theta}, \mu_{\theta x}, \mu_{rx}, \mu_{xr}$; $[\sigma_\theta]_p, [\sigma_r]_p, [\sigma_x]_p$ – модули нормальной упругости, коэффициенты Пуассона и пределы прочности при растяжении в тангенциальном θ, радиальном r и осевом x направлениях, соответственно, материала корпуса АРС калибра 202мм (боралюмоуглепластика).

Для изготовления корпусов АРС калибра 202 мм, имеющих длину в 2,5 раза выше чем 152 мм АРС и вследствие этого обладающего пониженной изгибной жесткостью, влияющей на точность поражения цели, рассматривалось применение боралюмоуглепластика (ППН 1:2), в котором для продольного армирования используется бора-

люминиевый полуфабрикат, [3], а поперечное армирование осуществляется углеродным волокном ВМН-4. Такой материал практически не уступает стеклопластику по удельной прочности, но значительно превосходит его по удельной изгибной жесткости.

Применение указанного композиционно-волокнистого материала при изготовлении несущего кожуха опытного ствола 30мм артиллерийского автомата позволило повысить технические характеристики ствола, влияющие на точность стрельбы, что подтверждено результатами стендовых и полигонных испытаний [4].

Из рис.3 видно, что кривая $\Delta S - \Delta q$ имеет экстремум, что позволяет сделать предположение о существовании оптимальной массы (q =32*кг*), обеспечивающей максимальное увеличение дальности метания АРС калибра 152мм на 12,1% (опытный 2– рис.2в, табл.2) вследствие частичной замены стального корпуса штатного снаряда стеклопластиковым (табл.1, рис.2в). В то же время указанный вариант исполнения обеспечивает значительное увеличение ΔV_{∂},% (на 24,9%), что значительно увеличивает могущество боеприпаса и его боевую эффективность артиллерийского и ракетного оружия.

Полная замена металла в корпусе на стеклопластик (опытный 1 – рис.2б) приводит к значительному снижению массы Δq,%=58,1% и увеличению дульной скорости ΔV_{∂},%=56,1% снаряда. Однако, имеющее место снижение инерционности АРС, обладающих малой массой, вследствие расходования кинетической энергии на преодоление сил сопротивления, сокращает дальность метания ($\Delta S_{мет}$,% = 26,4%). В то же время, применение АРС с указанным корпусом может оказаться эффективным при стрельбе на малые расстояния, т.к. высокая дульная (начальная) скорость способствует высокой пробиваемости цели.

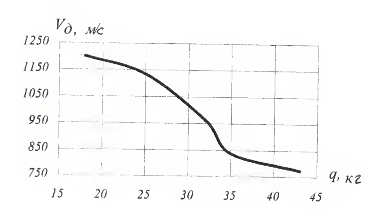


Рис .3. Зависимость изменения дальности метания $\Delta s_{мет}$ от изменения Δq массы АРС

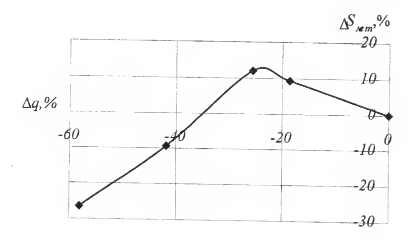


Рис. 4. Зависимость дульной скорости $V_д$ от массы q 152мм АРС

В то же время полная или частичная замена в корпусе снаряда металла на стеклопластик приводит к некоторому повышению максимального уровня интенсивности напряжений в ТТ $\sigma_{i_{max}}$ по причине увеличения осевых a_x и центробежных ϖ_x перегрузок (табл.2),что приводит к незначительному снижению вероятности безотказной работы РДТТ. Повышение вероятности безотказной работы двигателя АРС калибра 152мм может быть достигнуто путем внесения конструктивных изменений в РДТТ, например изменением количества и толщины прокладок поз. 5,6 (рис.2а), приводящее к снижению максимального уровня напряжений в ТТ [2]. Замена стального корпуса 202мм АРС на боралюмоуглепластиковый приводит к снижению массы АРС на 35,9%, повышению дульной скорости на 27,2% и дальности метания на 29,2% (табл.2). Имеющее при этом место, снижение максимального уровня интенсивности напряжений в ТТ связано с увеличением перегрузок, приводящих к повышению контактных давлений на границе корпус РДТТ –ТТ (опытный1 и опытный 2, табл. 2). Это, в свою очередь, повышает вероятность безотказной работы двигателя и эксплуатационную надежность АРС. Увеличение дальности метания снаряда калибра 202мм позволяет, уменьшив массу заряда ТТ, величина объемного веса которого практически не отличается от объемного веса боевого заряда (ВВ), за счет его длины, например в два раза ($\Delta L_{дв} = -50\%$, табл. 2 –опытный 2), повысить могущество АРС, увеличив массу ВВ кратно вышеуказанному. Уменьшение длины заряда ТТ за счет улучшения контакта с корпусом приведет к еще большему по сравнению со штатным снарядом снижению максимального уровня интенсивности напряжений в ТТ ($\sigma^{(m)}{}_{i_{max}}/[\sigma]^{(m)}{}_c$=0,51), повышению вероятности без- отказной работы (до 0,91) и, как следствие, повышению эксплуатационной надежности РДТТ и всего АРС в целом.

Таблица 2. Конструктивные, динамические, прочностные характеристики и параметры движения АРС

№ п/п	Характеристики и параметры АРС	Калибр АРС					
		152мм			202мм		
		штат-ный	опыт-ный 1	опыт-ный 2	штат-ный	опыт-ный 1	опыт-ный 2
1	$q, кг$	42,7	18,2	32	135,7	87	87
2	$L_{сн}, мм$	700	700	700	2332	2332	2332
3	$L_{дв}, мм$	170	170	170	1356	1356	678
4	$a_x, g \cdot 10^{-3} м/с^2$	10,74	24,42	19,54	1,26	2,47	2,47
5	$\varpi_x, рад/с$	1062	1579	1210	53,2	61	61
6	$t_д, мс$	14,4	9,6	10,5	70,3	36,3	36,3
7	$V_д, м/с$	770	1202	962	297	378	378
8	$S_м \cdot 10^{-3}, м$	14,053	10,336	15,753	6,592	8,520	8,520
9	$\sigma^{(m)}{}_{i_{\max}}, МПа$	24,3	24,6	24,45	18,6	17,8	9,8
10	$[\sigma]^{(m)}{}_c, МПа$	25	25	25	19	19	19
11	$\Delta q,\%$	0	-58,1	-25,6	0	-35,9	-35,9
12	$\Delta V_д,\%$	0	56,1	24,9	0	27,2	27,2
13	$\Delta L_{дв},\%$	—	—	—	—	—	-50
14	$\Delta S_{мет},\%$	0	-26,4	12,1	0	29,2	29,2
15	$\Delta\sigma_{i_{\max}},\%$	0	1,23	0,62	0	-4,3	-47,3
16	$\sigma^{(m)}{}_{i_{\max}} / [\sigma]^{(m)}{}_c$	0,972	0,984	0,978	0,98	0,94	0,51
17	$p(\sigma^{(m)}{}_{i_{\max}} \le [\sigma]^{(m)}{}_c)$	0,70	0,72	0,71	0,86	0,88	0,91

ВЫВОДЫ

1. Полная или частичная замена металлического корпуса активно-реактивного снаряда на композиционно волокнистый может способствовать повышению его баллистических характеристик: увеличению дальности поражения и скорости встречи снаряда с целью и, как следствие – повышению боевой эффективности и могущества ракетно-артиллерийского оружия.

2. Использование боралюминиевого полуфабриката для продольного армирования в композиции с углеродным волокном повышает изгибную жесткость корпуса снаряда, влияющую на точность поражения цели, работоспособность РДТТ и эксплуатационную надежность АРС.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Д.П.Александров, В.А.Санников. Анализ прочности метаемых тел при импульсном нагружении. Тезисы докладов XIX Международной Конференции "Математическое моделирование в механике сплошных сред на основе методов граничных и конечных элементов" СПб: НИИХ СПбГУ, 2001.124с.
2. Д.П.Александров, В.А.Санников, О.В.Митряева. Использование методов математической статистики при информационно-системном анализе работоспособности твердотопливных ракетных двигателей. Материалы V Международной Конференции "Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности металлоконструкций и методы их решения" СПб, 2003. 622с.
3. Шоршоров М.Х., Кудинов В.В., Галкин Ю.А., Ковалев И.С., Анкудинов В.Д., Цирлин А.М. Опытное производство плазменных полуфабрикатов композиционных материалов на основе борных нитей. Труды ГНИИх и ТЭС, под редакцией А.М.Цирлина, М., 1978.
4. Д.П.Александров. Теоретическое и экспериментальное исследование возможности и целесообразности применения артиллерийских стволов из композиционных материалов. Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук. Л.,1980. 256с.

SUMMARY._Numerical simulation of influence of strain-stress properties of solid propellant and rocket case material at substitution metal case by glass-fibre-reinforced plastic on battle effectiveness of impulse-reaction shell and reliability of its functioning is shown. Statistical analysis of solid-rocket jet efficiency and recommendation on performance attributes increase are given.

УДК 539.3:623.4

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КОМБИНИРОВАННЫХ УДАРНИКОВ С ПРЕГРАДАМИ

В.П. ГЛАЗЫРИН, Ю.Н. ОРЛОВ, М.Ю. ОРЛОВ

НИИ прикладной математики и механики при Томском государственном университете, Томск, Россия
E-mail: glvp@list.ru

АННОТАЦИЯ. Разработана методика компьютерного моделирования взаимодействия ударников с преградами из различных конструкционных материалов. Спрогнозированы результаты взаимодействия, а также выявлено влияние материалов сердечников на пробивное действие ударников. Установлено, что за счет изменения компоновки и формы ударника для дозвуковой скорости взаимодействия можно существенно увеличить его пробивное действие.

В настоящей работе при помощи методов математического моделирования [1,2] исследуется процесс пробития преград осесимметричными комбинированными ударниками по нормали. Рассматриваются ударники оживальной и затупленной формы, оболочечные и полуоболочечные. Конструктивно ударники являются телами вращения и состоят из трех элементов: стальной оболочки, свинцовой рубашкой и сердечника. Диаметры всех составных частей ударников равны. Внешний диаметр оболочки равен 9,25 мм, толщина – 0,5 мм, масса – 3,53 г, материал – мягкая сталь. Диаметр сердечника равен 7,4 мм. Масса рубашки – 1,6 г. Материал сердечников: сталь У10А, сталь 10, свинец, вольфрамовый сплав (ВНЖ), уран, золото. Материал преград: сплав Д16, сталь 3, высокопрочная сталь (ВПС), титан. Скорость удара – 290 м/с.

Экспериментальные исследования проведены на баллистическом стенде с использованием пороховой метательной установки [3]. Начальные и запреградные скорости ударников регистрировались с помощью индукционного измерителя и рам-мишеней. Ошибка измерителя скорости не превышала 1%. В экспериментах использованы ударники с сердечниками из стали У10А, преграды из сплава Д16 толщиной 4 мм и 8 мм и преграды из стали 3 толщиной 4 мм. На рис.1а приведены обозначения и схемы ударников в разрезе. Здесь 1- сердечник, 2 – оболочка, 3 – рубашка. Ударники оживальной формы обозначены как В1, В2, В3. Затупленной формы – В4. Ударник В2 – полуоболочечный, а ударник В3 – оживальный с затупленным сердечником. Массы составных элементов всех ударников, использованных в эксперименте равны. Результаты

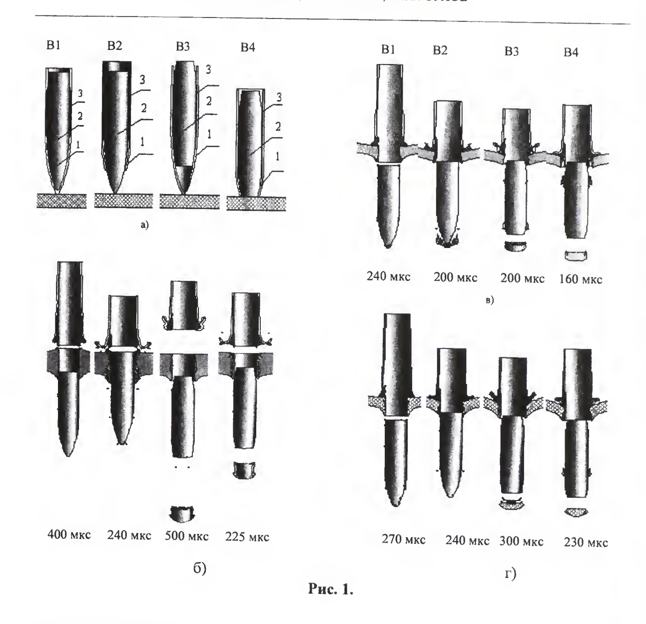


Рис. 1.

измерений запреградной скорости, пересчитанные для начальной скорости удара 290 м/с приведены в таблице 1

Детальный анализ процесса пробития преград проведен при помощи методики компьютерного моделирования, базирующейся на основных положениях механики сплошных сред в рамках двумерной постановки для осевой симметрии в лагранжевых независимых переменных [1,2]. Разработанный программный комплекс позволяет прогнозировать действие ударного и взрывного нагружения материала с учетом волновых эффектов и фрагментарного разрушения при реализации отрывного или сдвигового механизмов, что дает возможность избежать нефизических деформаций и адекватно описать таким образом изучаемые процессы и явления. Необходимые физико-механические характеристики рассматриваемых материалов взяты из работ [4,5].

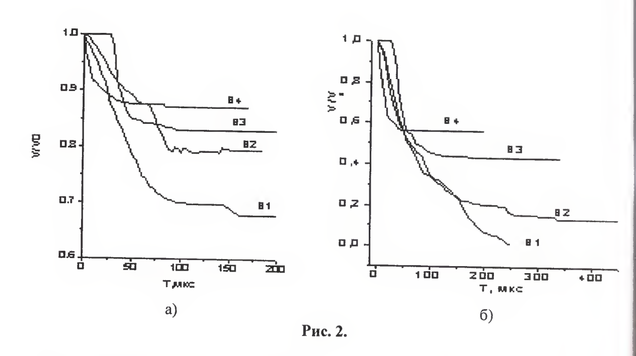
Результаты вычислений в виде текущих конфигураций ударник-мишень представлены на рис.1б для преград из сплава Д16 толщиной 8 мм, на рис.1в для сплава Д16 толщиной 4 мм и на рис.1г для стали 3 толщиной 4 мм. Видно, что во всех случаях, как и в эксперименте [3] пробитие преград для ударников В1 и В2 происходит по механизму «прокола», а для ударников В3 и В4 по механизму срезания «пробки». Форма и остаточные размеры оболочки, сердечника и пробоины, полученные расчетным и экспериментальным путем, соответствуют друг другу. На рис. 1б видно, что для данного варианта имеет место отскок оболочки от лицевой поверхности преграды, обусловленный упругой реакцией материала.

В таблице 1 приведены рассчитанные значения запреградных скоростей центров масс ударников. Хорошее совпадение с экспериментом получено в случае стальной преграды, расхождение не превышает 2,7%. Для преград из сплава Д16 наибольшее расхождение расчетных и экспериментальных данных достигает 4,6% (толщина 4 мм, ударник В3) и 3,4% (толщина 8 мм, ударник В3).

На рис.2а представлены рассчитанные зависимости скорости центра масс сердечников от времени при пробитии преграды из сплава Д16 толщиной 4 мм. Вид этих зависимостей отражает характерные для каждого типа ударников способы пробития преграды. Так для ударников В1 и В2 кривые скорости центра масс вначале более пологи, чем аналогичные участки кривых для типов В3 и В4. Это вызвано тем, что сила сопротивления внедрению ударников с оживальной головной частью возрастает плавно вслед за плавным увеличением поперечного сечения сердечника в отличие от ударников с затупленной головной частью. При внедрении ударников с оживальной головной частью деформируется и уплотняется объем материала преграды вокруг оживала по всей его длине, а при внедрении ударников с затупленной головной частью происходит сдвиг материала преграды, приводящий к образованию пробки по диаметру сердечника.

Таблица 1.

Преграда / Ударник		Д16 (4 мм)	Д16 (8мм)	Ст.3 (4 мм)
В1 (м/с)	Расчет	196	98	167
	Эксп - т	190	95	166
В2 (м/с)	Расчет	232	131	182
	Эксп - т	241	135	186
В3 (м/с)	Расчет	226	90	149
	Эксп - т	216	87	147
В4 (м/с)	Расчет	253	174	183
	Эксп - т	258	173	188



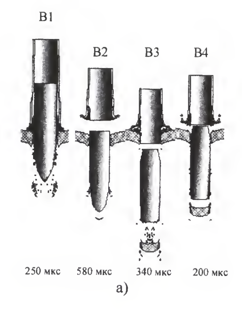
а) б)

Рис. 2.

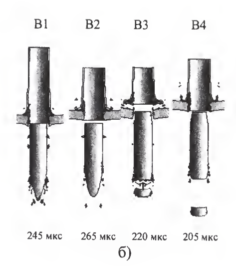
Далее с целью прогноза смоделирован процесс взаимодействия показанных на рис.1а ударников с 4-х мм преградами из ВПС (динамический предел текучести равен 0,9 Гпа) и титана. Рассчитанные конфигурации ударник-мишень для преград из ВПС приведены на рис. 3а. Видно, что в этом случае для ударников В2 и В4 имеет место отскок оболочки от преграды, а для ударников В1 и В3 оболочки деформируясь сминаются на лицевой поверхности преграды. Ударник В1 пробивает преграду и движется дальше со скоростью 52 м/с. Снижение скорости ударника В2 заканчивается через 160 мкс от начала процесса, ударника В3 – через 180 мкс, ударника В4 – через 60 мкс (рис.2б).

Рассчитанные конфигурации ударник-мишень для варианта с титановой преградой приведены на рис.3б. Видно, что динамика пробития и картины разрушения преград и ударников мало отличаются от вариантов расчетов, представленных на рис.1в и рис.1г. Снижение скорости ударника В1 в этом случае заканчивается через 270 мкс от начала процесса, ударника В2 – через 110 мкс, ударника В3 – через 200 мкс и ударника В4 – через 60 мкс.

Вычисленные значения запреградных скоростей центров масс ударников приведены в табл.2. Видно, что также как и для преград из сплава Д16 наибольшим пробивным действием обладает ударник В4, а наименьшим – В1. Причем в вариантах с титановой преградой для ударников В1 и В2 запреградные скорости отличаются на 46%, а для ударников В3 и В4 – на 5,4%.



а)



б)

Рис.3.

Таблица 2.

Уд – ник	Д16 (м/с)	Ст.3 (м/с)	ВПС (м/с)	Титан (м/с)
B1	196	167	52	89
B2	232	182	83	130
B3	226	149	129	185
B4	253	183	151	195

Для выявления влияния материала сердечника на пробивное действие ударника смоделирован процесс взаимодействия ударников B1 и B4 с 4-х мм преградой из стали 3. В качестве материалов сердечников рассмотрены сталь 10, свинец, уран, ВНЖ и золото. Выбор последних трех материалов продиктован соображением целесообразности сравнения механизмов действия ударников с тяжелыми прочными (ВНЖ) и слабопрочными (Au) сердечниками. Рассчитанные текущие конфигурации ударник-мишень для ударников с сердечниками из ВНЖ, урана и золота представлены на рис.4.

В табл.3 приведены рассчитанные значения запреградных скоростей ударников с сердечниками из шести различных материалов. Во второй строке таблицы приведены массы ударников. Получено, что запреградная скорость ударника с сердечником из стали 10 в несколько раз меньше, чем для аналогичного ударника с сердечником из

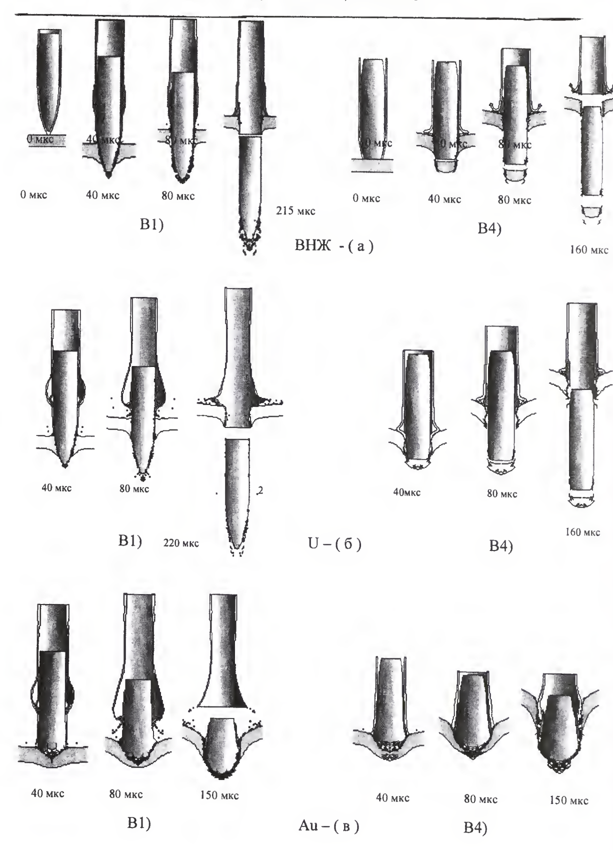

0 мкс
40 мкс
80 мкс
0 мкс
40 мкс
80 мкс
215 мкс
B1)
ВНЖ - (а)
0 мкс
40 мкс
80 мкс
B4)
160 мкс
40 мкс
80 мкс
2
B1)
220 мкс
U – (б)
40мкс
80 мкс
160 мкс
B4)
40 мкс
80 мкс
150 мкс
B1)
Au – (в)
40 мкс
80 мкс
150 мкс
B4)

Рис.4.

Таблица 3.

Сердеч-к / Уд-ник	У10А	Ст.10	Pb	ВНЖ	U	Au
Масса (г)	14,96	14,96	19,3	26,73	28,46	29,33
В1(м/с)	167	24	0	233	241	163
В4 (м/с)	185	50	0	249	253	197

У10А. Ударник со свинцовым сердечником растекается в радиальном направлении по преграде, образуя в ней вмятину, но, не пробивая ее. Значение запреградных скоростей для ударников с золотыми сердечниками получились близкими к значениям для ударников с сердечниками из стали У10А, несмотря на то, что к концу процесса золотые сердечники были сильно деформированными и имели грушевидную форму (рис.4в). Ударники с сердечниками из ВНЖ (рис.4а) имели запреградную скорость на 39% и 32% выше, чем ударники с сердечниками из стали У10А, хотя масса последних в 1,8 раза меньше. Самое высокое значение запреградной скорости равное 253 м/с получено для ударников с сердечниками из урана (рис.4б). В этом случае для ударника В1 наблюдается отскок оболочки от преграды, пробитие проходило по механизму “прокола”, снижение скорости закончилось к 180 мкс. Для ударника В4 пробитие проходило по механизму срезания “пробки”, а снижение скорости закончилось к 40-й мкс.

Таким образом, установлено, что за счет изменения компоновки и формы ударника для дозвуковой скорости взаимодействия можно существенно увеличить его пробивное действие. Кроме этого, при помощи разработанной методики компьютерного моделирования спрогнозированы результаты взаимодействия рассмотренных ударников с преградами из различных конструкционных материалов, а также выявлено влияние материалов сердечников на пробивное действие ударников.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Глазырин В.П., Орлов Ю.Н., Ольшанская Г.Г. Моделирование процесса пробития преград комбинированными ударниками // Вычислительные технологии. 2002. Т. 7, ч. 2. Спец. выпуск. С. 144-153.
2. Глазырин В.П., Орлов М.Ю., Орлов Ю.Н. Анализ взаимодействия компактных ударников со скрепленными преградами // Сборник материалов III научной конференции Волжского регионального центра РАРАН «Современные методы проектирования и

отработки ракетно-артиллерийского вооружения». В двух томах.- Саров, РФЯЦ ВНИИЭФ, 2004.-Т.2. С. 538-543.
3. Глазырин В.П., Орлов Ю.Н., Фролов Ю.З. Влияние компоновки ударника на его пробивное действие.// Вестник Томского ун-та. Изд-во Том. ун-та, №2, 2005 г.
4. Высокоскоростные ударные явления / Под ред. Николаевского В.Н., М.: Изд-во Мир, 1973. С.533.
5. Канель Г.И., Разоренов С.В., Уткин А.В., Фортов В.Е. Ударноволновые явления в конденсированных средах, М.: Изд-во Янус-К, 1996. С.407.

SUMMARY. The method of numerical simulation of the interaction of projectiles with the plates of different materials is developed. The results of its interaction and influence of projectile material on penetrating action are defined. The influence of composition and form of projectile on penetrating action at subsonic speed is shown.

УДК 677-486.1

ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ УГЛЕРОД-УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ НАГРУЖЕНИИ

Ю.В. АПАКИДЗЕ*, А.А. ТИХОНОВ*, А.В. УТКИН**, Б.Р. ГАФАРОВ***

* ФГУП "МИТ", Москва, Россия
** ИПХФ РАН, Москва, Россия
*** ФЦДТ «Союз» , Москва, Россия

АННОТАЦИЯ. Приведены результаты экспериментальных исследований поведений углерод-углеродных материалов при ударно-волновом нагружении. Полученные результаты показывают высокую чувствительность структуры фронта ударных волн и откольной прочности к структуре композиционных материалов.

Композитные материалы на основе углеродных волокон находят широкое применение в качестве элементов конструкций, испытывающих высокие силовые и тепловые нагрузки. Поэтому прогнозирование результатов импульсного воздействия на эти конструкции является важной практической задачей, для решения которой требуется знание реологических и теплофизических свойств вещества. Однако имеющийся набор опытных данных о поведении композитных материалов при ударно-волновом воздействии крайне малочисленен [1-4]. В данной работе проведены эксперименты по исследованию структуры фронта ударных волн и откольной прочности в трех различных углерод-углеродных материалах (УУМ) при давлении порядка 2 ГПа (20 кбар).

УУМ представляют собой объемно-армированные композиты, отличающиеся между собой способом плетения углеродных волокон в пирографитовой матрице.

Схема экспериментов приведена на рис. 2. С помощью плосковолнового взрывного генератора 1 в стальном экране 2 диаметром 120 мм и толщиной 20 мм формировалась ударная волна амплитудой 9 ГПа и длительностью около 10 мкс. Исследуемые образцы 3 имели размер 60х60 мм, толщину 5-10 мм, находились в контакте с экраном и были ориентированы таким образом, чтобы плоскость расположения армирующих углеродных волокон была параллельна фронту ударной волны. Структура фронта ударной волны и величина откольной прочности определялись по скорости свободной поверхности. Для регистрации скорости использовался лазерный интерферометр VISAR [5] с постоянной интерферометра, равной 80,8 м/с, что позволило провести измерения с точностью ± 2 м/с и временным разрешением около 3 нс. Для отражения лазерного луча, на поверхность образца наклеивалась алюминиевая фольга 4 толщиной 7 мкм. Луч интерферометра фокусировался в пятно диаметром около 100 мкм.

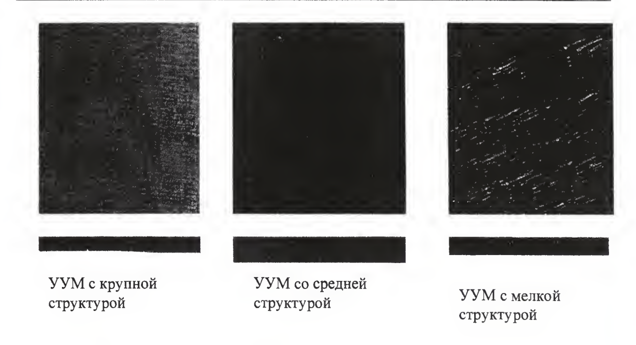


Рис. 1. Структура образцов УУМ

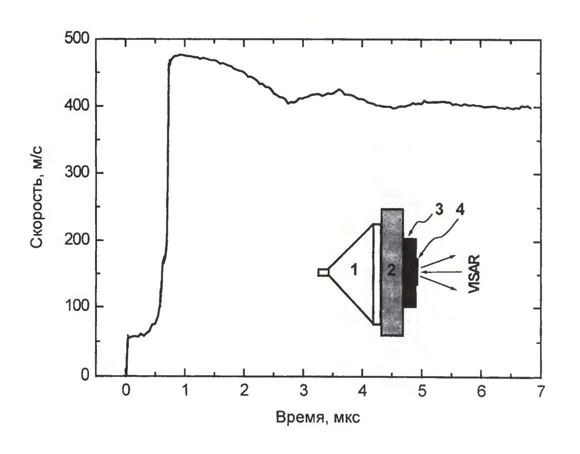


Рис. 2. Схема экспериментов и профиль скорости свободной поверхности экрана

Для определения параметров ударной волны, входящей в образец, предварительно проведены измерения скорости свободной поверхности стального экрана при отсутствии образца (рис.2). Видно, что в экране формируется двухволновая структура, обусловленная упруго-пластическими свойствами стали (Ст3), поэтому сначала на свободную поверхость выходит упругий предвестник (амплитуда которого равна 1.3 ГПа), а примерно через 0.6 мкс пластическая волна сжатия. Если между экраном и образцом обеспечить акустический контакт, то такая двухволновая конфигурация будет входить в образец. В действительности же, из-за наличия воздушной прослойки, упругий предвестник затухает и в начальный момент времени в образце формируется ударный скачок с характерной шириной около 100 нс. На рис. 2 видно также, что после достижения максимума, скорость свободной поверхности экрана начинает уменьшаться, что обусловлено волной разгрузки со стороны плосковолнового генератора. В результате, в экране возникают растягивающие напряжения, что приводит к разрушению – отколу, проявляющемуся на профиле скорости свободной поверхности в виде характерного откольного импульса и последующих колебаний скорости. Величина откольной прочности Ст3, найденная из данного опыта, равна 1.5 ГПа.

Результаты экспериментов с УУМ приведены на рис.3.

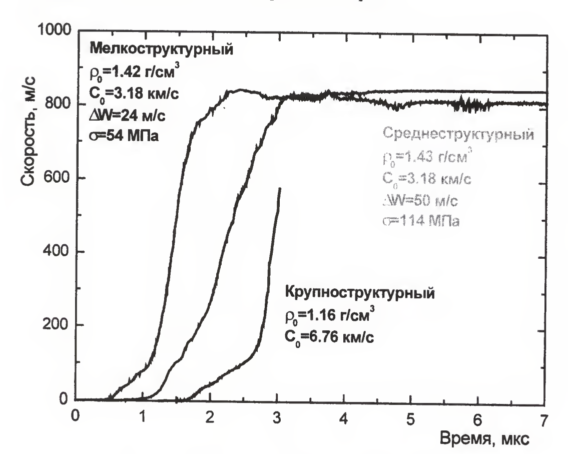


Рис. 3. Профили скорости свободной поверхности композитов

Там же указаны начальная плотность материала ρ_0 и скорость звука c_0, измеренная на ультразвуковой установке с использованием сигналов высокой амплитуды (~1 бар). Для мелко- и среднеструктурного материалов скорость звука имеет величину, типичную для композитов подобного типа, около 3 км/с, тогда как в крупноструктурном материале зарегистрирована аномально высокая скорость звука – почти 7 км/с, что гораздо больше, чем у всех подобных материалов. Одна из гипотез, объясняющих столь высокую скорость распространения возмущений – это то, что малые возмущения распространяются вдоль углеволокна, имеющего, как известно, очень высокий модуль упругости. Однако даже в этом случае дополнительно необходимо предположить, что значительная доля волокон ориентирована под большими углами к плоскости образца.

Отличительной чертой всех трех профилей скорости является наличие предвестника, амплитуда которого монотонно возрастает от нуля до максимального значения равного примерно 0.2 ГПа для мелко- и среденеструктурного, и 0.5 ГПа для крупноструктурного. Причем, его наличие, как уже отмечалось, не связано с упругим предвестником в стальном экране, а обусловлено механическими свойствами композиционных материалов. Вслед за предвестником регистрируется относительно резкое нарастание скорости до максимального значения в мелко- и среднеструктурном материалах. В материале с крупной структурой не удалось записать полностью фронт ударной волны, поскольку возмущения плоскостности волны за счет структуры материала или его разрушения на фронте оказались слишком высоки. Характерная ширина фронта ударной волны при заданных условиях нагружения определяется структурой вещества и, как видно из рис.3, мелкая и средняя структуры в этом смысле существенно отличаются друг от друга: ширина фронта для средней структуры превышает 1 мкс, тогда как для мелкой она примерно вдвое меньше. Столь заметное различие является следствием того, что мелкоструктурный материал имеет отчетливо выраженную продольно-ориентированную структуру, тогда как среднеструктурный – более поперечно-ориентирован. Если для описания эволюции волн малой амплитуды в этих материалах применять модель вязкой жидкости, то их коэфициенты вязкости также будут отличаться вдвое [6]. Вероятно, более корректными для описания подобных материалов являются релаксационные модели [7], основной параметр которых – время релаксации – также извлекается из анализа структуры фронта ударной волны.

Выполненные оценки являются корректными лишь при выполнении условия стационарности ударных волн, что вообще говоря требует дополнительной проверки, в частности, проведения измерений при изменении толщины образцов. Это обстоятельство не является принципиальным для оценки ширины фронта, но без подобных экспериментов сложно обсуждать природу предвестника, отчетливо регистрируемого для всех трех композитов. Если, например, он «убегает» вперед, то следует говорить о наличии особенности на ударной адиабате, аналогичной пределу текучести для упругопластических сред. Причем ответить на вопрос, будет ли этот предел действительно

связан с обратимым переходом материала в область пластического течения или он совпадает с порогом разрушения на сжатие, можно лишь в результате выполнения достаточно сложных и многочисленных экспериментов. Если же предвестник образует единый стационарный комплекс, то его формирование обусловлено особенностях кинетики релаксационных процессов во фронте ударной волны, которые также могут носить как обратимый, так и необратимый характер.

Проведенные эксперименты наряду с шириной фронта ударной волны позволяют определить величину откольной прочности в средне- и мелкоструктурном материале. Поскольку входящие в образцы импульсы сжатия являлись треугольными (рис.1), то их взамодействие со свободной поверхностью приводит к растягивающим напряжениям, максимальное значение которых (откольная прочность) определялось по формуле: $\sigma=0.5\rho_0 c_0 \Delta W$ – где ΔW – перепад скорости свободной поверхности между максимумом и ее значением перед откольным импульсом (рис.3). Любопытно отметить, что, как и ширина фронта ударной волны, откольная прочность среднеструктурного материала в два раза больше, чем мелкоструктурного. Это может быть отражением того факта, что скорость образования несплошностей при импульсном растяжении лимитируется скоростью вязкого роста пор [8] и если предположить, что ширина фронта ударной волны и скорость роста пор определяются одной и той же вязкостью, то полученный результат является очевидным. Отметим, что материалы сохранили, по крайней мере частично, прочность на сжатие.

Для дополнительного анализа механического поведения материалов также были проведены измерения диаграмм деформирования при статическом сжатии. Результаты представлены на рис. 4.

Отметим, что поскольку сжатие происходило параллельно плоскости армирования, то заметной поперечной деформации не наблюдалось (коэффициент Пуассона близок к нулю). Сжатие проводилось до появления первых признаков разрушения. Крупноструктурный образец разрушился до отдельных прядей и рассыпался, на среднеструктурном было заметно расслоение между слоями армирования, а мелкоструктурный сохранился практически без изменений, что наблюдается и по кривым разгрузки. Материалы оказались сравнительно «мягкими» по сравнению с монолитными материалами – модуль Юнга составил порядка 0,7 ГПа и скорость звука, вычисленная по соотношению $c = \sqrt{E/\rho}$ получилась на уровне 0,7 км/с, что типично для высокопористых материалов. Отклонения на начальных участках и в начале кривых разгрузки связаны с особенностями испытательной машины; поведение материалов при сжатии практически линейно вплоть до нагрузок порядка 1-1,5 кбар и очень высокой деформации – 20-25%, причём мелкоструктурный материал практически не потерял сопротивления на сжатие.

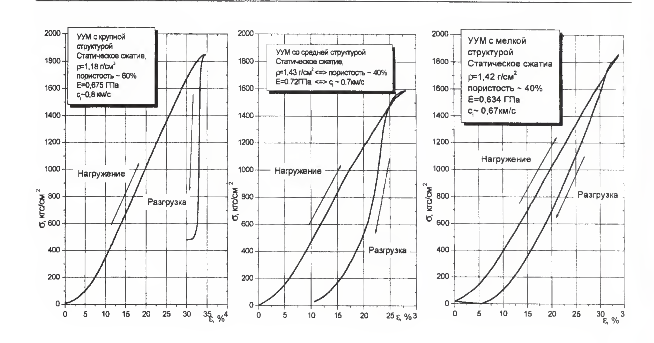


Рис. 4. Диаграммы статического сжатия

Сопоставление ударноволновых и статических данных по сжатию материалов говорит о том, что наблюдаемый на фронте ударной волны предвестник действительно имеет упругий характер, поскольку лежит в том же диапазоне амплитуд, что и статические пороги начала разрушения – по-видимому, происходит разрушение пироуглеродной матрицы; однако в среднеструктурном материале, а в особенности мелкоструктурном, поперечно ориентированные волокна остаются неразрушенными и при амплитудах волны ~ 20 кбар. Крупная же структура плетения волокна не препятствует разрушению, причем за счёт связующего, а не волокна, которое в условиях сжатия, как статического, так и ударно-волнового, будет подвергаться большему деформированию.

Таким образом, проведенные эксперименты показывают высокую чувствительность структуры фронта ударных волн и откольной прочности к структуре композитных материалов, а подходы механики сплошных сред, разработанные для описания монолитных материалов при ударно-волновых воздействиях, применительно к композитным, а в особенности к пористым, нуждаются в серьёзной доработке.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дудка К.К., Преображенский И.Н., Шестаков А.С. // Мех. комп. мат. 1983. №4. С.624.
2. Фитцер Э. Углеродные волокна и углекомпозиты. М.: Мир, 1988.
3. Батьков Ю.В., Новиков С.А. Синицын Л.Н., Чернов А.В. // Мех. комп. мат. 1979. №2. С.322.
4. Бушман А.В., Ефремов В.П., Ломоносов И.В., Уткин А.В., Фортов В.Е. // ТВТ, 1990. Т.29. С.1232.
5. Канель Г.И., Разоренов С.В., Уткин А.В., Фортов В.Е. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. М.: Янус-К, 1986.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986.
7. Кристенсен Р. Введение в механику композитов. М.: Мир, 1982.
8. Уткин А.В. // ПМТФ, 1992, №6. С.82.

SUMMARY. The results of experimental researches of carbon-carbonic composit material by shock-wave load are given. The results show a high sensitivity of shock wave structure and slabbing durability to composit material structure.

УДК 623.4.017

ТЕРМОЭРОЗИОННАЯ И МЕХАНИЧЕСКАЯ СТОЙКОСТЬ СТВОЛОВ АРТИЛЛЕРИЙСКИХ АВТОМАТОВ

Д.П.АЛЕКСАНДРОВ, В.Ф. ЗАХАРЕНКОВ,* В.С. ЦЕПЕЛЕВ*

СПбГПУ, Санкт-Петербург, Россия
*БГТУ " ВОЕНМЕХ", Санкт-Петербург, Россия

АННОТАЦИЯ. Приводится математическое описание модели термоэррозионной и механической стойкости стволов артиллерийских автоматов в условиях стрельбы короткими или длинными очередями с темпом стрельбы 600 выстр./мин. Комплексная математическая модель включает описание процессов внутренней баллистики, теплообмена, теплопроводности и износа с учетом структурно-фазовых превращений в материале орудийной стали, а также механических и температурных напряжений 1-го и 2-го рода, возникающих при циклическом высокоимпульсном тепловом нагружении. Результаты численных исследований по разработанной модели иллюстрируются примером расчетов 30-мм гипотетической автоматической пушки, имеющей начальную скорость снаряда 960 м/с и максимальное давление 380 МПа. Ствол изготовлен из орудийной стали 38ХНМФА.

Существующий в проектной практике метод расчета стволов стрелкового и артиллерийского оружия на прочность основан на макроструктурном подходе, основанном на гипотезе о том, что живучесть ствола определяется снижением только его баллистических характеристик вследствие износа поверхности канала ствола под действием тепловых, силовых нагрузок, а также химического взаимодействия поверхностного слоя металла с продуктами сгорания пороховых газов. При этом интенсивность износа зависит от локальных характеристик газового потока и тепловых и механических характеристик металла. Такой традиционный подход не учитывает микроструктуру металла по его толщине и ее изменение в результате циклического теплового и силового воздействия и ее изменение в результате структурно-фазовых превращений и, как показывает опыт, дает завышенные значения циклической долговечности ствола [1].

При макроструктурном подходе к оценке прочности материал стенки ствола представляется как сплошная среда со среднеинтегральными характеристиками прочности и пластичности, определяемыми при его механических испытаниях в статических условиях. Оценка работоспособности конструкции выполняется на основе анализа ее напряженно-деформированного состояния, компоненты которого получаются на основе указанного подхода. Так, в стволе – толстостенной трубе, механические напряже-

ния, обусловленные действием давления пороховых газов, достигают экстремальных значений (Мизес – Р, рис.1) на его внутренней поверхности, что и определяет положение опасных точек.

Накопление повреждений в результате знакопеременных циклических напряжений приводит к снижению долговечности и механической живучести. Следует отметить, что кроме рассматриваемых термических напряжений, связанных с температурными градиентами, и называемых напряжениями первого рода, в металлах, вследствие их неоднородности, обусловленной поликристаллическим строением, возникают термические микронапряжения, называемые напряжениями второго рода или термоструктурными. Результаты экспериментального исследования стали 12Х18Н10Т на образцах при изотермическом термоциклировании, т. е. при отсутствии термонапряжений первого рода, в интервале температур 300 - 900 К свидетельствуют о присутствии в металле термоструктурных напряжений высокого уровня, подтверждением чему служит большое количество повреждений на поверхности образцов: микротрещин – с 1500 термоциклов (тц), и макротрещин – с 5000 тц (рис. 2) [2].

Природа термических напряжений, связанных с теплосменами в результате чередования термического воздействия газового потока и охлаждения стенки, обусловлена градиентами температуры по её толщине. При этом в наиболее нагретых слоях стенки, расположенных в непосредственной близости к поверхности канала ствола, действуют сжимающие, а в менее нагретых (внутри стенки) – растягивающие напряжения, т. е. имеет место разгрузка поверхности канала ствола со смещением опасных точек в радиальном направлении, что способствует повышению его несущей способности (Мизес – РТ, рис. 1).

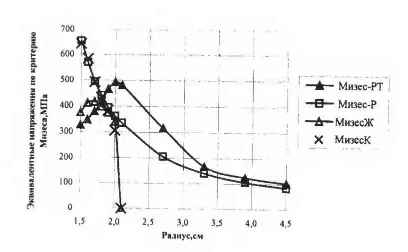


Рис. 1. Интенсивности напряжений по критерию Мизеса для гладкостенного ствола

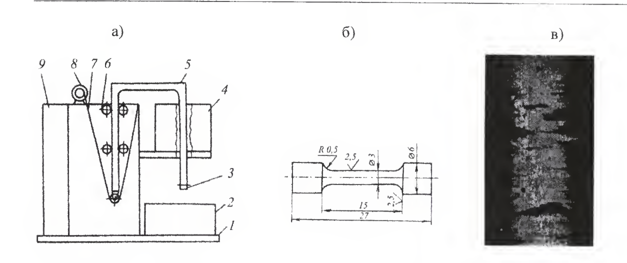


Рис. 2. К экспериментальному исследованию термоструктурных напряжений при изотермическом нагреве

а – схема установки для термоусталостных испытаний при нестесненных температурных деформациях:

1 – основание; 2 – ванна холодильника; 3 – испытываемый образец; 4 – электропечь; 5 – рама; 6 – роликовая направляющая рамы; 7 – подъемный трос; 8 – электродвигатель подъемно-транспортного механизма рамы с образцом; 9 – блок управления;

б – образец для испытаний;

в – поверхность образца после 2500 теплосмен (увеличение в 100 раз)

Расчетные макротермические напряжения, значения которых обычно используются при оценке прочности стволов артиллерийских орудий, снижают уровень интенсивности напряжений в опасных точках на поверхности канала ствола во время выстрела и поэтому приводят к заниженной оценке механического износа ствола. Однако в реальных условиях в стенке нагретого ствола одновременно с указанными напряжениями действуют и так называемые термоструктурные напряжения, обусловленные различием коэффициентов термической деформации (коэффициентов линейного расширения) главных структурных компонентов легированной стали (железа и карбидов металлов), а также образованием взаимно переходящих друг в друга структур мартенситного и аустенитного превращения.

Расчет температурных полей по толщине стенки ствола и износа проводился с помощью программного комплекса СТРИЖ, включащего программы расчета внутренней баллистики [3], теплообмена [4], теплопроводности, диффузии и термоизноса [5]. На рис. 3 показан характер изменения мартенситного и аустенитного превращения в различных слоях по толщине стенки ствола в поперечном сечении, соответствующем

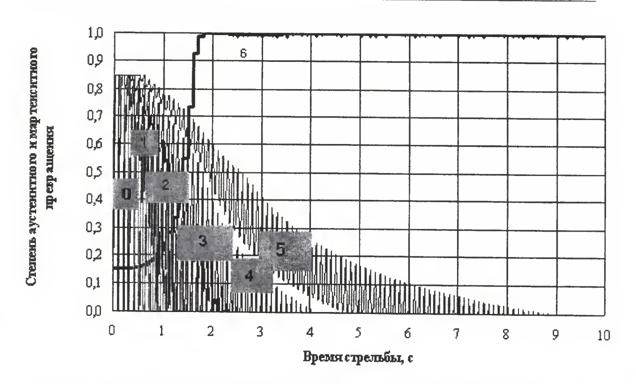


Рис. 3. Характер изменения мартенситного и аустенитного превращения в орудийной стали 38ХНМФА при непрерывной стрельбе очередью 120 выстрелов с темпом 10 выс/с: 0 – изменение относительного содержания мартенсита на поверхности канала ствола; 1 – изменение относительного содержания мартенсита в слое на глубине 50 мк; 2 – изменение относительного содержания мартенсита в слое на глубине 75 мк; 3 – изменение относительного содержания мартенсита в слое на глубине 100 мк; 4 – изменение относительного содержания мартенсита в слое на глубине 125 мк; 5 – изменение относительного содержания мартенсита в слое на глубине 150 мк; 6 – аустенитное превращение на поверхности канала ствола с учетом износа

приложению максимальной газодинамической и термомеханической от выстрела (5 калибров от начала калиберной части).

Рассмотренные режимы стрельбы приводят к термоэрозионнму износу поверхности канала ствола. Характер изменения радиального износа и максимальной скорости износа в зависимости от текущего выстрела для непрерывной очереди представлен на рис. 4 и рис. 5.

Полученные данные позволяют перейти к оценке механической живучести стволов при импульсном высокотемпературном нагружении.

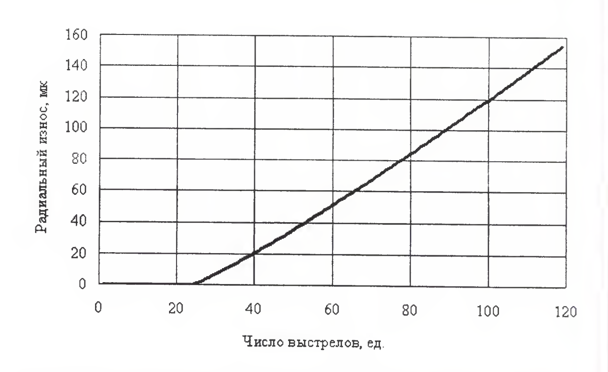


Рис.4. Характер изменения термического износа от числа выстрелов в очереди

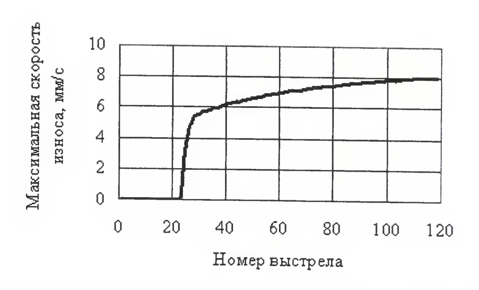


Рис.5. Характер изменения максимальной скорости термического износа в зависимости от номера выстрела в непрерывной очереди

Наличие в слоях ствола различных линейных температурных деформаций приводит к появлению дополнительных напряжений растяжения-сжатия и, как следствие этого, к снижению циклической долговечности ствола и уменьшению его механической живучести. Признаком таких напряжений при циклическом термическом и сило-

вом нагружении является постепенное появление и развитие сетки трещин на внутренней поверхности канала ствола. Для решения проблемы формирования таких трещин необходимо знать уровень циклических напряжений в режиме нагрев-охлаждение. Как показали расчеты, термоструктурные напряжения между выстрелами и к началу текущего выстрела могут достигать предела текучести материала ствола, а непосредственно при выстреле даже превосходить его.

Для оценки уровня термических напряжений в легированной стали при изотермическом нагреве вследствие различия коэффициентов термического расширения между фазовыми составляющими предлагается структурная модель указанной стали в виде дисперсно-упрочненного композита (КМ) с матрицей из углеродистой стали (ж) и карбидами легирующих элементов (к) в качестве наполнителя (рис. 6) [6], [7].

При расчете напряженного состояния представим элемент в виде двух составных частей: диска с сердечником (*I*) и стержневой системы (*II*) (рис. 7). При этом напряженное состояние элемента будем рассматривать как сумму плоского осесимметричного и линейного напряженных состояний с компонентами $\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_x$. Напряжения в диске (I)определим как функцию давления на поверхности контакта (ж – к). Для многослойного диска имеет место зависимость $[a_{ij}]\times[P_i]=[L_i]$, где $[a_{ij}]$ – матрица податливости, $[P_i]$ – матрица контактных давлений по границам слоев, $[L_i]$ – матрица нагрузок [8].

Для двухслойного диска имеем

$$[a_{11}]\times[P_1]=[L_1], \tag{1}$$

где $a_{11}=\frac{r_1^2}{r_2^2-r_1^2}\left(1+\frac{r_2^2}{r_1^2}\right)-\mu\frac{r_1^2}{r_2^2-r_1^2}\left(1-\frac{r_2^2}{r_1^2}\right)+1-\mu$, $L_1=(\alpha_к-\alpha_ж)E_ж E_к\Delta T$.

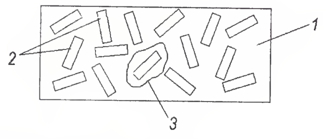


Рис. 6. Структурная модель легированной стали:
1 – матрица (углеродистая сталь); 2 – карбиды легирующих элементов;
3 –элемент объема материала

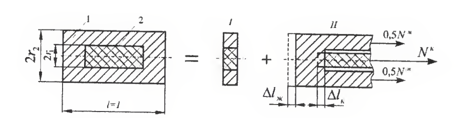


Рис. 7. К расчету напряженного состояния элемента материала: 1 – цилиндр (углеродистая сталь – *ж*); 2 –сердечник (карбиды – *к*); *I* – диск с сердечником; *II* – стержневая система

Поскольку объем матрицы значительно превосходит объем наполнителя, то при расчетах напряжений можно считать, что диск имеет бесконечную толщину, т. е. $r_2 \to \infty$, а $\lim a_{11}\big|_{r_2 \to \infty} = 2$. Из (1) имеем

$$p_1 = \frac{(\alpha_ж - \alpha_к)E_к E_ж \Delta T}{E_ж(\mu_к - 1) - E_к(\mu_ж + 1)}. \tag{2}$$

Напряжения в диске бесконечной толщины определяются выражением, $\sigma_{r,\theta} = \mp P_1 \dfrac{r_2^2}{r^2}$.

При $r = r_1$ $\sigma^{ж}_{r,\theta} = \pm p_1, \sigma^{к}_{r,\theta} = -p_1$: $\sigma^{к}_{r,\theta} = \dfrac{(\alpha_ж - \alpha_к)E_к E_ж \Delta T}{E_к(\mu_ж + 1) - E_ж(\mu_к - 1)}$, $\sigma^{ж}_{r,\theta} = \pm \dfrac{(\alpha_ж - \alpha_к)E_к E_ж \Delta T}{E_к(\mu_ж + 1) - E_ж(\mu_к - 1)}$.

Осевые напряжения в стержневой системе (*II*) определим при условии равенства осевых перемещений ее элементов $\Delta l_ж = \Delta l_к$. При этом имеем $N^ж = -N^к = N$ или $N = \dfrac{(\alpha_к - \alpha_ж)E_к A_к \Delta T}{1 + \dfrac{E_к A_к}{E_ж A_ж}}$. Для цилиндра бесконечной толщины $\lim N\big|_{A_ж \to \infty} = (\alpha_к - \alpha_ж)E_к A_к \Delta T$ и $\sigma^к_x = \dfrac{N}{A_к}$, $\sigma^ж_x = \dfrac{N}{A_ж}$, где $A_ж, A_к$ – площади попереч-

ных сечений цилиндра и сердечника, соответственно. Окончательно получим $\sigma_x^к = (\alpha_ж - \alpha_к) E_к \Delta T$; $\sigma_x^ж = 0$.

Сравнение результатов эксперимента и расчета на основе предложенной модели показали их удовлетворительную сходимость ($N_{расч.} = 6984$ тц, $N_{эксп.} = 5000$ тц). При этом в качестве материала матрицы принималась сталь15 (с таким же содержанием углерода, как и сталь 12Х18Н10Т). Превышение $N_{расч.}$ над $N_{эксп.}$ может быть объяснено наличием остаточного ресурса у образцов после термоциклирования.

Так, испытания образцов при растяжении после 5000 тц показали снижение истинного предела прочности стали 12Х18Н10Т на 60-70 %. Проведены сравнительные практические расчеты циклической долговечности ствола 30мм артиллерийского автомата при режимной стрельбе с темпом 600 выстрелов в минуту и длиной очереди n_i (i=5,10,15,20 – количество выстрелов в очереди) с использованием обоих вышерассмотренных подходов. Расчеты проводились для наиболее нагруженного сечения ствола (0,15 м от начала калиберной (нарезной) части канала ствола). Материал ствола – сталь 38ХНМФА с категорией прочности КТ 80 ($\sigma_{0,02}$=800 МПа). Материал матрицы сталь 40 ($\sigma_и$ = 422 МПа).

Из рис. 1 видно, что интенсивность напряжений в матрице ((Мизес Ж) меньше, чем в наполнителе (карбиды хрома, никеля, молибдена – Мизес К) приблизительно в 2 раза, в то время как характеристики прочности указанных карбидов превышают соответствующие характеристики углеродистой стали в 5 – 10 раз. Отмеченный факт указывает на необходимость использования при оценке долговечности конструкции характеристик прочности и пластичности матрицы.

На рис. 8 представлено распределение интенсивности механических напряжений в сечении нарезного ствола ("Мизес показат." – интенсивность напряжений в % от $\sigma_{0,02}$), а на рис. 9 – распределение интенсивности термомеханических напряжений при макроструктурном подходе.

Для оценки долговечности ствола воспользуемся уравнением вида [9], [10]:

$$\varepsilon_{a_i} = \frac{e_c^T}{4N^m} + \frac{\sigma_{-1}^T}{1 + \frac{\sigma_{-1}^T}{\sigma_и^T}\frac{1+r}{1-r}},$$

здесь $e_c^T = 0,5\ln\frac{100}{100-\psi}$, $\varepsilon_{a_i} = \frac{1+\mu}{3E}\sigma_i$; для сталей с $\sigma_и \le 700$ МПа (сталь 40), m=0,5 и $\sigma_{-1}^T = 0,4\sigma_и$; для сталей с $\sigma_и >$ 700 МПа (сталь 38ХНМФА) m=0,36+0,0002), $\sigma_{-1}^T = (0,54 - 0,0002)\sigma_и$.

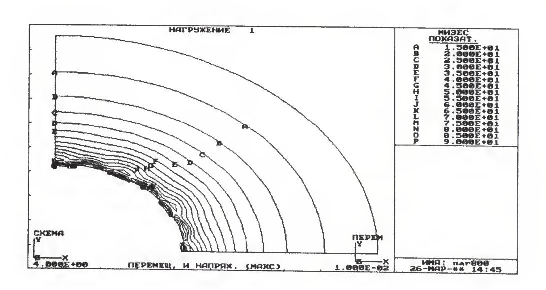


Рис. 8. Распределение интенсивности механических напряжений в сечении нарезной части канала ствола

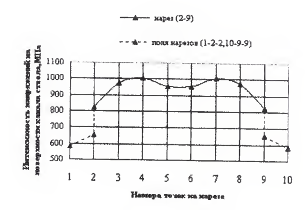


Рис. 9. Интенсивность напряжений на поверхности нарезной части ствола

При $r = \dfrac{\varepsilon_{\min_i}}{\varepsilon_{\max_i}} = 0$ (от нулевой цикл) имеем $\varepsilon_{a_i} = \dfrac{e_c^T}{4N^m} + \dfrac{\sigma_{-1}^T}{1 + \dfrac{\sigma_{-1}^T}{\sigma_u^T}}$.

На рис. 10 представлены результаты расчета долговечности на основе макроструктурного и микроструктурного подходов.

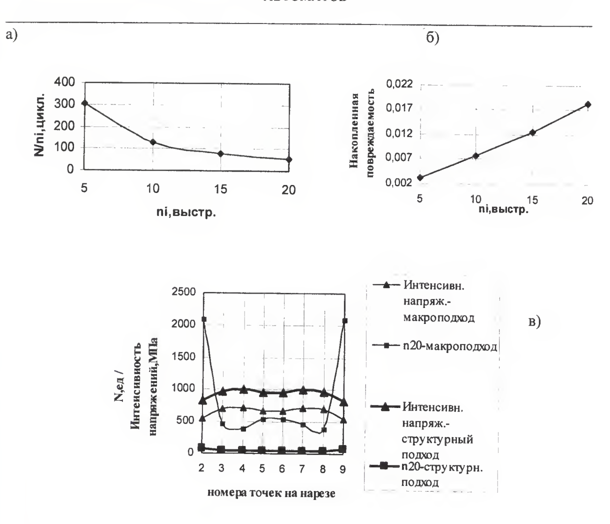


Рис. 10. Сравнительные результаты расчета долговечности при микроструктурном (а, б, в) и макроструктурном (в) подходах

ВЫВОДЫ

1. Показан возможный уровень мартенситного и аустенитного превращения в материале орудийной стали 38ХНМФА в условиях стрельбы короткими и длинными очередями при темпе стрельбы 600 выстрелов в минуту, а также величины радиального термического износа.

2. Разработан метод оценки циклической долговечности и механической живучести конструкций из высоколегированных сталей, в основу которого положена двух компонентная структурная модель исходного материала, а также – результаты численного анализа, полученные на ее базе, которые показали удовлетворительную сходимость с результатами экспериментальных исследований при изотермическом термоциклировании стали 12Х18Н10Т.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Орлов Б. В., Ларман Э. К., Маликов В. Г. Устройство и проектирование стволов артиллерийских орудий. -М.: Машиностроение, 1976, 431с.
2. Горкавчук И. М. Исследование термоструктурных усталостных повреждений стали 12Х18Н10Т при циклических теплосменах. Прочность материалов и конструкций. Ползучесть и длительная прочность – Труды ЛПИ № 393. Л. 1988. С. 37 – 41.
3. Захаренков В.Ф. Баллистическое проектирование орудий и импульсных метательных установок. Учебное пособие. СПб, БГТУ, 2000. 142 с.
4. Захаренков В. Ф. Метод расчета теплообмена в гладких и шероховатых трубах при течении горячих газовых потоков. Труды Всероссийской научно-практической конференции «Третьи окуневские чтения». СПб, 2004.
5. Zaharenkov V. F. Thermochemical erosion wear of cannon steels during single and burst cyclic action of powder gases. Proceedings of the III Work-shop "Unsteady combustion and interior ballistics", vol. 2, SPb, 26-30 June, 2000, pp. 450-464.
6. Александров Д.П. О влиянии термоструктурных напряжений на прочность поверхностно-упрочненной стальной трубы при импульсном циклическом нагружении // Металлообработка. – 4(22)/2004.С. 35–37.
7. Александров Д. П., Горкавчук И.М., Захаренков В.Ф. Импульсное высокотемпературное воздействие горячего газового потока на стенку из хромоникелевой стали. Инженерно-физический журнал, 2004. Т. 77, №1.
8. Александров Д. П. К исследованию напряженно-деформированного состояния ортотропных цилиндров. //Материалы V школы-симпозиума по механике деформируемого твердого тела, Куйбышев, 1978. С. 82 – 83.
9. Серенсен С. В., Когаев В. П., Шнейдерович Р. М. Несущая способность и расчеты на прочность деталей машин – М.: Машиностроение.1975. 488 с.
10. Махутов Н. А. Деформационные критерии разрушения и расчеты элементов конструкций на прочность. – М.: Машиностроение. 1981, 272 с.

SUMMARY. Mathematical model of artillery machine guns barrels termoerosion and mechanical life ability by firing a burst is given. Complex mathematical model include description of interior ballistics, heat exchange, heat conductivity and deterioration taking into account structural change and mechanical and temperature stress.

УДК 539.2: 539.3

МЕТОДИКА РАСЧЕТА УПРУГИХ ПАРАМЕТРОВ НАНОЭЛЕМЕНТОВ

А.В. ВАХРУШЕВ, А.А. ШУШКОВ

Институт прикладной механики УрО РАН, Ижевск, Россия

АННОТАЦИЯ. Разработана методика расчета упругих констант наноэлементов методом согласования перемещений составляющих их атомов с полями перемещений упругих "эквивалентных" элементов при различных видах нагружения. Приведены результаты расчетов модуля упругости наночастиц, нагруженных растягивающими сосредоточенными силами. Получены расчетные зависимости модуля упругости Юнга от диаметра наночастиц.

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что при изменении характерного размера наноэлементов (нановолокон, нанотрубок, наночастиц и т.д.) их физико-механические характеристики: прочность, модуль упругости, деформационные и другие параметры, - изменяются на порядок [1,2,4,5]. Расчетные и экспериментальные исследования показывают, что это обусловлено, в первую очередь, существенным изменением (причем не обязательно монотонным) структуры и формы наноэлемента [8-11]. Экспериментальное определение механических характеристик наноэлементов представляет технически сложную и трудоемкую задачу, вследствие малости размеров данных объектов. Поэтому моделирование является альтернативным и перспективным способом установления данных характеристик наноэлементов [3,6,7].

Целью настоящей работы являлась разработка методики расчета упругих констант наноэлементов и анализ их изменения в зависимости от характерного размера наноэлемента.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим наноэлемент объёмом Ω и поверхностью S, состоящий из N атомов (рис.1 - 1), и подобный ему по форме и размерам "эквивалентный" упругий элемент (рис.1 -2), нагруженные одинаковой системой уравновешенных внешних поверхностных $\overline{F_s}$ и объёмных $\overline{F_\Omega}$ сил (Рис. 1).

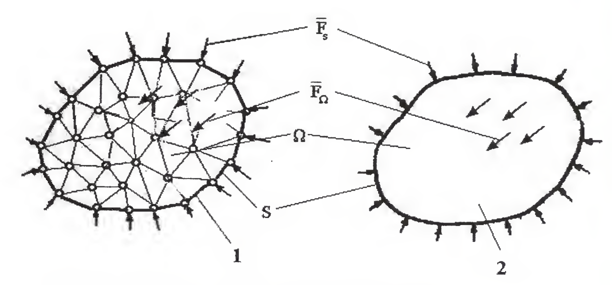


Рис. 1. Наноэлемент (1) и упругое “эквивалентное” тело (2)

Введём определение “эквивалентного” упругого элемента. Материал данного элемента тела считаем однородным и изотропным, следовательно, его упругие свойства определяются двумя константами [14]. Следует отметить, что в общем случае свойства наноэлемента могут быть неоднородными (возможную анизотропию свойств в данной работе не рассматриваем). Это обусловлено изменением атомной структуры наноэлемента в области его поверхности [7,9,11]. Поэтому понятие упругого “эквивалентного” элемента основывается на одинаковом отклике наноэлемента и упругого элемента на заданную систему нагрузок. Иными словами – изменение формы и размеров упругого “эквивалентного” элемента и наноэлемента должны быть равными при действии одинаковой заданной системы нагрузок.

Деформирование наноэлемента будем рассчитывать методом молекулярной динамики, согласно которому движение системы атомов, входящих в наноэлемент, определяется системой дифференциальных уравнений

$$m_i \frac{d^2 \bar{r}_i}{dt^2} = -\sum_{j=1}^{N} \bar{F}(\bar{r}_{ij}) + \bar{f}_i(t) - m_i b_i \frac{d\bar{r}_i}{dt} - \bar{F}\ , \tag{1}$$

где $m_i, \bar{r}_i = \bar{r}_i(x_i, y_i, z_i)$ - масса и радиус- вектор i-го атома, соответственно; $r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$ - радиус - вектор между атомами i и j; $\bar{F}(\bar{r}_{ij})$- сила взаимодействия между атомами i и j; b_i- коэффициент “трения”;

$\overline{F} = \overline{F_\Omega} + \overline{F_s}$ - суммарный вектор внешних сил; $\overline{f_i}(t)$ - случайная сила, действующая на i-ый атом, определяемая из распределения Гаусса со следующими свойствами: среднее значение случайной силы $\overline{f_i}(t)$ равно нулю; она не коррелирует со скоростью $\overline{\upsilon_i}(t)$ рассматриваемого атома, так что $< \overline{f_i}(t)\overline{\upsilon_i}(t) >$ равно нулю и $< \overline{f_i}(t)\overline{f_i}(0) >= 2k_B T_0 b_i m_i \delta(t)$. Здесь k_B - постоянная Больцмана; $\delta(t)$ - дельта функция Дирака; T_0 - температура.

Как правило, сила взаимодействия между атомами определяется соотношением

$$\overline{F}(\overline{r_{ij}}) = -\frac{\partial V(r_{ij})}{\partial r_{ij}}, \tag{2}$$

где $V(\overline{r_{ij}})$ - потенциал.

Постановка задачи статического расчета упругого изотропного тела включает:
- дифференциальные уравнения равновесия

$$\overline{\nabla} * \hat{\sigma} = 0, \tag{3}$$

- уравнения связи между тензором деформаций $\hat{\varepsilon}$ и вектором перемещений $\overline{u}$

$$\hat{\varepsilon} = \frac{1}{2}\left(\overline{u} \otimes \overline{\nabla} + \overline{\nabla} \otimes \overline{u}\right), \tag{4}$$

определяющие уравнения упругого тела

$$\hat{\sigma} = \mathbf{D}(\overline{x})\hat{\varepsilon}, \tag{5}$$

где $\mathbf{D}(\overline{x})$ - матрица упругих констант материала.

Решение системы уравнений (3)-(5) позволит вычислить вектор перемещений, тензор деформаций и тензор напряжений в упругом “эквивалентном” элементе, которые зависят от матрицы упругих констант. Согласование решений задачи молекулярной динамики и теории упругости осуществляем по векторам перемещений в точках, совпадающих с положением атомов нанообъекта

$$\overline{u}_e = \overline{u}_{md}, \tag{6}$$

где $\overline{u}_e, \overline{u}_{md}$ - векторы перемещений упругого “эквивалентного” элемента и наноэлемента, соответственно.

Для выполнения условия (6) осуществляется варьирование упругих констант упругого "эквивалентного" элемента, таким образом, чтобы суммарная ошибка, определяемая разностью векторов перемещений, была минимальна.

МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

В качестве примера, поясняющего разработанную методику, приведем расчет модуля упругости наночастицы, нагруженной осевыми растягивающими силами (рис.2).

В расчетах использован потенциал Леннарда-Джонса

$$V(r_{ij}) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}\right]. \qquad (7)$$

Здесь ε - глубина потенциальной ямы; σ - значение r_{ij}, при котором $V(r_{ij})$ равно нулю.

Для интегрирования системы уравнений (1) и (4) используем алгоритм Верле [12,13].

Рассмотрим использование предложенной методики на примере наночастиц цинка. Количество атомов в наночастицах варьировалось от 216 до 9261. Диаметр равновесных наночастиц цинка при этом принимает значения от 12 до 50 ангстрем.

Величина силы растяжения составляла $F_1 = 2.086 * 10^{-11} H$ и подбиралась таким образом, чтобы атом, к которому она прикладывается, не отрывался от частицы. Основным результатом расчета деформирования наночастицы является зависимость радиальных перемещений атомов u от расстояния до центра масс наночастицы r (рис.3).

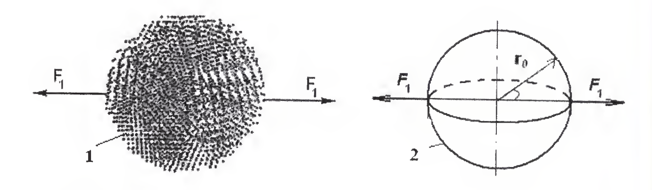


Рис. 2. Равновесная наночастица (1) и упругий "эквивалентный" элемент (шар) (2), растягиваемые сосредоточенными силами

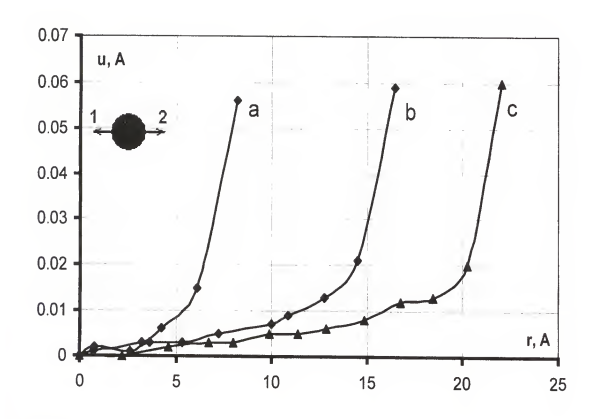


Рис. 3. Зависимость перемещений u от расстояния r до центра масс наночастицы цинка, содержащей: a - 512, b - 3375, c - 8000 атомов, соответственно; u и r приведены на графике в ангстремах (A)

Задача расчета упругого "эквивалентного" элемента (шара) при растяжении сосредоточенными силами имеет аналитическое решение [14]:

$$u=\frac{(1+\nu)F_1}{2\pi r_0 E}\sum_{n=0}^{\infty}(4n+3)\left\{(\cos\alpha)\frac{P_{2n+1}(\cos\alpha)}{2n+1}+\left[n(2n+1)\rho^{-2}-n(2n-1)-\nu(4n+1)\right]*\right.$$
$$\left.*\frac{P_{2n+1}(\cos\alpha)}{m_n}\right\}\rho^{2n+1}, \tag{8}$$

где r_0 - радиус шара; E - модуль Юнга; ν - коэффициент Пуассона; $P_{2n}(\cos\alpha)$ - полиномы Лежандра; $\rho=r/r_0<1$; F_1 - величина растягивающей силы. Функция m_n определяется из выражения:

$$m_n=(1+\nu)(4n+1)n+n+1 \tag{9}$$

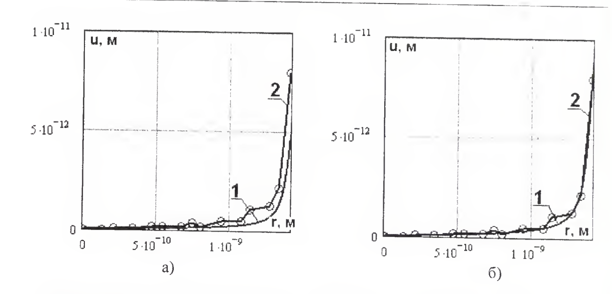


Рис. 4. Зависимость перемещений u от радиуса r: 1 – для упругого шара, 2 – для наночастицы, состоящей из 2197 атомов;а) E = 9.5*10^10 Па, bб) E= 5.25*10^10 Па

На рис.4-а-1 сплошной линией представлена зависимость перемещений от расстояния до центра “эквивалентного” упругого элемента для модуля Юнга $E = 9.5 * 10^{10}\,Па$ и коэффициента Пуассона $\nu = 2.1$. На этом же графике (рис.4-а-2) приведена зависимость радиальных перемещений атомов u_a от расстояния до центра масс наночастицы r. Видно, что указанные зависимости не совпадают. Поэтому, изменяя модуль Юнга, добиваемся слияния данных кривых (рис. 4б). Критерием этого является среднеквадратичная ошибка, изменение которой в зависимости от модуля Юнга приведено на рис.5. Из данного графика видно, что среднеквадратичная ошибка имеет ярко выраженный минимум, которому соответствует наилучшее совпадение векторов перемещений. В данной точке и определяется модуль упругости наночастицы.

Выполняя данную процедуру для наночастиц различного диаметра, строим зависимость модуля Юнга от диаметра наночастицы (рис.5). Очевидно, что модуль Юнга увеличивается при уменьшении размера наночастиц, и это качественно совпадает с экспериментальными данными [1].

По аналогичной методике построены расчетные зависимости модуля Юнга от радиуса наночастиц цезия и магния. На рис.7 приведена зависимость относительного мо дуля Юнга $\bar{E}$ от радиуса r для наночастиц из различных материалов. В качестве относительного модуля выбрано отношение модуля Юнга к асимптотическому его значению при максимальном диаметре наночастицы.

Рис.7 иллюстрирует общую тенденцию увеличения модуля Юнга, однако у различных материалов она неодинакова. Относительный модуль цинка увеличивается более чем в 6 раз, а модуль цезия только в 1.5 раза.

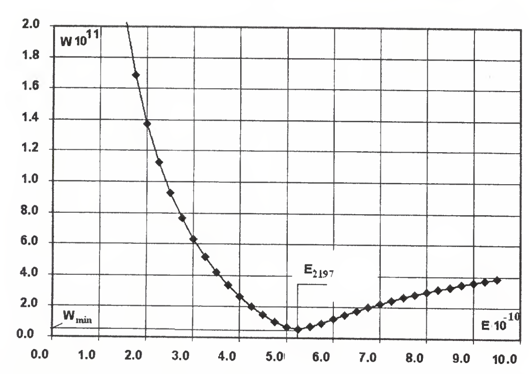


Рис.5. Зависимость среднеквадратичной ошибки **W** от модуля Юнга **E** упругого "эквивалентного" элемента; E_{2197}- модуль Юнга (Па) наночастицы, содержащей 2197 атомов

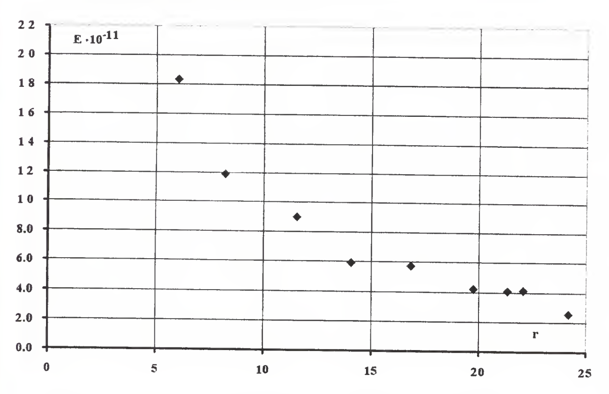


Рис.6. Зависимость модуля Юнга **E** (Па) от радиуса **r** (A) наночастиц цинка

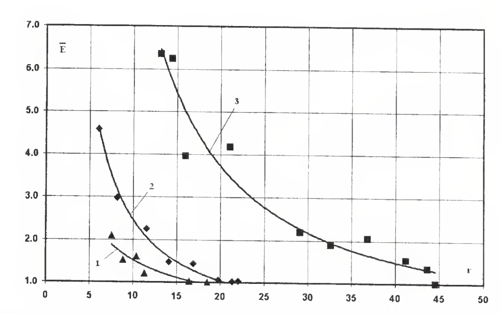


Рис. 7. Зависимость относительного модуля Юнга $\bar{E}$ от радиуса r (A) для наночастиц из различных материалов: 1- цезий, 2-магний, 3- цинк

ВЫВОДЫ

Разработана методика определения модуля упругих констант наноэлементов. Проведенные расчеты позволили выявить основные закономерности зависимости модуля Юнга от размера наночастиц. Численные расчеты показали, что модуль Юнга увеличивается при уменьшении размера наночастиц цинка, цезия, магния.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Qing-Qing Ni, Yaqin Fu, Masaharu Iwamoto. Evaluation of Elastic Modulus of Nano Particles in PMMA/Silica Nanocomposites // Journal of the Society of Materials Science, Japan. -2004. -v.53. -N9. -pp.956-961.
2. Ruoff R. S., Pugno Nicola M. Strength of nanostructures // Mechanics of the 21st Century. Proceeding of the 21-th international congress of theoretical and applied mechanics. – Warsaw: Springer, 2004.- p.p.303-311.
3. Diao J., Gall K., Dunn M. L. Atomistic simulation of the structure and elastic properties of gold nanowires // Journal of the Mechanics and Physics of Solids.- 2004.- V. 52.- N. 9.- p.p. 1935-1962.
4. Dingreville R., J. Qu, Cherkaoui M. Surface free energy and its effect on the elastic behavior of nano-sized particles, wires and films // Journal of the Mechanics and Physics of Solids.- 2004.- V. 53.- N. 8.- p.p. 1827-1854.

5. Duan H.L., Wang J., Huang Z.P., Karihaloo B.L. Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress // Journal of the Mechanics and Physics of Solids.- 2005.- V. 53.- N.7.- p.p. 1574-1596.
6. Лагунов В.А., Синани А.Б.. Компьютерное моделирование деформирования и разрушения кристаллов // Физика твердого тела. - 2001.-Т.43.- N4.- С.644-650.
7. Вахрушев А.В. Моделирование статики и динамики кластеров на макро - , мезо - и микроструктурных уровнях // Вестник ИжГТУ: Периодический научно-теоретический журнал. - Ижевск: Изд-во ИжГТУ, 2001.- № 1.- С. 25-29.
8. Гусев А.И., Ремпель А.А. Нанокристаллические материалы. - М.: Физматлит., 2001. - 224с.
9. Заводинский В. Г. Атомная структура и электронное строение нанометровых систем на основе кремния: Дисс. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.07. - 1997.
10. Петрунин В.Ф., Зеленюк Ф.М. и др. Особенности атомной структуры ультрадисперсных систем// Физикохимия ультрадисперсных систем: Матер. I Всес. конф. – М., 1987. – С. 60-67.
11. Hoare M.R. Structure and dynamics of simple microclusters // Adv. Chem. Phys. - 1979.- v.40.- p.p. 49-135.
12. Д.В. Хеерман. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. - М.: Наука, 1990.-176с.
13. В.А. Полухин, В.Ф. Ухов, М.М. Дзугутов. Компьютерное моделирование динамики и структуры жидких металлов. М.: Наука, 1981.
14. В.И. Блох. Теория упругости. Харьков, 1957.-465с.

SUMMARY. The calculation procedure of nanoelement elastic constants by a method of the displacements atoms coordination with elastic displacements fields of elastic "equivalent" elements at different loading type have developed. The results of elastic nanoparticles modulus calculations are represented. Dependences of an elastic modulus on nanoparticles diameter are obtained.

УДК 532.519.6

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ ЖИДКОСТИ С ПЕРЕМЕННЫМИ ВЯЗКИМИ СВОЙСТВАМИ В ИЗОГНУТЫХ КАНАЛАХ

А.А. ВАХРУШЕВ, А.М. ЛИПАНОВ, А.В. ВАХРУШЕВ

Институт прикладной механики УрО РАН, Ижевск, Россия

АННОТАЦИЯ. Рассмотрена задача моделирования двумерных течений неньютоновских жидкостей в криволинейных каналах. Проведены численные расчеты параметров псевдопластической среды, описываемой с помощью реологической модели Пауэлла - Эйринга, и исследованы физические явления, возникающие при локальном изменении температуры стенки канала.

ВВЕДЕНИЕ

В процессе движения жидких сред в различных устройствах, таких как трубопроводы, перерабатывающее оборудование, при извлечении вязких ископаемых из несущих пластов зачастую геометрия каналов, по которым происходит движение, является определяющим фактором, влияющим на основные параметры потока. Наличие выступов, изгибов приводит к возникновению вихревых течений, уменьшению расхода жидкости вследствие возрастающего градиента давления. Дополнительными факторами, усложняющими анализ указанных физических процессов, являются реологические характеристики жидкости: вид реологического закона, определяющий, каким образом реагирует среда с той или иной внутренней структурой на внешнюю нагрузку; пределы изменения коэффициента вязкости, его связь с температурным полем и т.д. Многофакторное исследование комплексного влияния указанных выше факторов на параметры течения обусловливает актуальность использование математического моделирования. Настоящее исследование является развитием работы [1], в которой рассматривалось течение неньютоновских жидкостей в прямом канале при наличии структурных (дискретных) изменений вязких свойств среды под действием температурного поля. Рассмотрена задача течения в плоском двумерном канале, состоящем из прямых участков, соединенных изогнутым ("коленом"), в предположении, что на входе в изогнутую часть на одной из адиабатических стенок происходит нарушение теплоизоляции, и жидкость локально охлаждается.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Для расчета параметров течения в комбинированном канале, состоящем из прямолинейных и криволинейных участков, необходимо использовать криволинейные координаты для аппроксимации конечных разностей в криволинейной части трубы. В общем случае применяются различные методы построения разностных сеток - аналитические или численные [2,3]. Общее требование к различным методам построения - линии сетки должны быть ортогональными для повышения точности расчетов. В случае сложных нестационарных задач требуется перестроение сетки на каждом временном шаге, что приводит к увеличению объема временных ресурсов, необходимых для решения задачи. Предположим, что изогнутая часть канала имеет постоянный радиус кривизны. В этом случае можно использовать полярные координаты r,φ. Они являются частным случаем цилиндрических координат при отсутствии движения вдоль оси z [4]. Используя зависимости

$$x = r\cdot\cos\varphi,\quad r=\sqrt{x^2+y^2},$$
$$y = r\cdot\sin\varphi,\quad \varphi=\arctan\frac{y}{x}.$$

можно получить аналитические формулы перехода от уравнений Навье -Стокса в декартовых прямоугольных координатах к их записи в криволинейных координатах.

Общая форма уравнений Навье -Стокса с учетом переменной вязкости может быть представлена в виде [7]:

$$\frac{Dv_\varphi}{Dt}=-\frac{1}{\rho\cdot r}\frac{\partial P}{\partial\varphi}+\frac{1}{r}\frac{\partial(S_{\varphi\varphi})}{\partial\varphi}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial(r^2\cdot S_{\varphi r})}{\partial r},\tag{1}$$

$$\frac{Dv_r}{Dt}=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial r}+\frac{1}{r}\frac{\partial(S_{r\varphi})}{\partial\varphi}+\frac{1}{r}\frac{\partial(r\cdot S_{rr})}{\partial r}-\frac{S_{\varphi\varphi}}{r},\tag{2}$$

$$\frac{1}{r}\left[\frac{\partial v_\varphi}{\partial\varphi}+\frac{\partial r\cdot v_r}{\partial r}\right]=0,\tag{3}$$

где $S_{\varphi\varphi},S_{rr},S_{\varphi r},S_{r\varphi}$ - компоненты тензора напряжений.

$$S_{\varphi\varphi}=2\eta\left[\frac{1}{r}\frac{\partial v_\varphi}{\partial\varphi}+\frac{v_r}{r}\right],$$

$$S_{\varphi r} = S_{r\varphi} = \eta\left[\frac{1}{r}\frac{\partial v_r}{\partial \varphi} + \frac{\partial v_\varphi}{\partial r} - \frac{v_\varphi}{r}\right],$$

$$S_{rr} = 2\eta\frac{\partial v_r}{\partial r}. \qquad (4)$$

Если предположить, что вязкость жидкости η не меняется по времени и внутри области интегрирования, то уравнения (1),(2) упрощаются до вида:

$$\frac{\partial v_\varphi}{\partial t} + v_r\frac{\partial v_\varphi}{\partial r} + \frac{v_\varphi}{r}\frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{v_r v_\varphi}{r} = -\frac{1}{\rho \cdot r}\frac{\partial P}{\partial \varphi} + \eta\left[\Delta v_\varphi - \frac{v_\varphi}{r^2} + \frac{2}{r^2}\frac{\partial v_r}{\partial \varphi}\right], \qquad (5)$$

$$\frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r\frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\varphi}{r}\frac{\partial v_r}{\partial \varphi} - \frac{v_\varphi^2}{r} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial r} + \eta\left[\Delta v_r - \frac{v_r}{r^2} - \frac{2}{r^2}\frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi}\right], \qquad (6)$$

где

$$\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \qquad (7)$$

Переход к безразмерным переменным при решении задачи течения жидкости в криволинейном канале позволяет записать (5)-(6)

$$\frac{Dv_\varphi}{dt} = -\frac{\partial P}{\partial \varphi} + \frac{1}{Re}\left[\Delta v_\varphi - \frac{v_\varphi}{r^2} + \frac{2}{r^2}\frac{\partial v_r}{\partial \varphi}\right], \qquad (8)$$

$$\frac{Dv_r}{dt} = -\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{1}{Re}\left[\Delta v_r - \frac{v_r}{r^2} - \frac{2}{r^2}\frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi}\right], \qquad (9)$$

где $Re = \frac{\rho \cdot U_0 \cdot (R_2 - R_1)}{\eta}$ – число Рейнольдса, характеризующее тип течения (ламинарное/турбулентное); R_1, R_2 – внутренний и внешний радиусы кривизны канала; U_0 – характерная скорость потока, втекающего в канал (в частности, берется максимальное значение скорости на оси канала, соответствующее профилю Пуазейля); η, ρ – кинематическая вязкость жидкости и плотность среды, соответственно.

Уравнение неразрывности (3) для использования в дальнейших преобразованиях можно представить как:

$$\frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + v_r + r\frac{\partial v_r}{\partial r} = 0 \qquad (10)$$

с учетом условия $r \neq 0$.

Уравнения энергии движения (8)-(10) записаны для физических переменных "скорость-давление". В первом приближении будем считать, что расход жидкости на входе в канал постоянный. Тогда из расчетов можно исключить давление и свести исходную систему уравнений к двум неизвестным – "вихрь-функция тока".

Для вывода уравнения переноса "вихря" ω использовались соотношения:

$$\omega_{\text{поляр.}} = \frac{1}{r}\left[\frac{\partial\left(r v_{\varphi}\right)}{\partial r} - \frac{\partial v_r}{\partial \varphi}\right], \tag{11}$$

$$v_{\varphi} = \frac{\partial \psi_{\text{поляр}}}{\partial r}, \quad v_r = -\frac{1}{r}\frac{\partial \psi_{\text{поляр.}}}{\partial \varphi}, \tag{12}$$

$$\omega_{\text{поляр}} = \frac{\partial^2 \psi_{\text{поляр.}}}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial \psi_{\text{поляр.}}}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 \psi_{\text{поляр.}}}{\partial \varphi^2} \equiv \Delta \psi_{\text{поляр.}}. \tag{13}$$

Легко показать, что переменные $v_{\varphi}, v_r, \omega_{\text{поляр.}}, , \psi_{\text{поляр.}}$ в пределе, при радиусе кривизны $r \to \infty$, совпадают со своими аналогами в декартовых координатах u, v, ω, ψ. Это утверждение помогает осуществить переход на границах прямого и изогнутого участков трубы от полярных к декартовым координатам. Далее опустим нижний индекс и будем обозначать "вихрь" и "функцию тока" как ω и , соответственно.

Для получения уравнения переноса вихря в полярных координатах исключим давление из уравнений закона сохранения импульса (5)-(6)., используя представление ω в виде (11):

$$\begin{aligned}
\frac{v_{\varphi}}{r}\frac{\partial \omega}{\partial \varphi} + v_r\frac{\partial \omega}{\partial r} = \frac{v_{\varphi}}{r}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial v_{\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{\partial^2 v_{\varphi}}{\partial \varphi \partial r} - \frac{1}{r}\frac{\partial^2 v_r}{\partial \varphi^2}\right] + \\
+ v_r\left[-\frac{v_{\varphi}}{r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial v_{\varphi}}{\partial r} + \frac{\partial^2 v_{\varphi}}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial v_r}{\partial \varphi} - \frac{1}{r}\frac{\partial^2 v_r}{\partial \varphi \partial r}\right] = \\
= \frac{v_{\varphi}}{r^2}\frac{\partial v_{\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{v_{\varphi}}{r}\frac{\partial^2 v_{\varphi}}{\partial \varphi \partial r} - \frac{v_{\varphi}}{r^2}\frac{\partial^2 v_r}{\partial \varphi^2} - \\
-\frac{v_{\varphi} v_r}{r^2} + \frac{v_r}{r}\frac{\partial v_{\varphi}}{\partial r} + v_r\frac{\partial^2 v_{\varphi}}{\partial r^2} + \frac{v_r}{r^2}\frac{\partial v_r}{\partial \varphi} - \frac{v_r}{r}\frac{\partial^2 v_r}{\partial \varphi \partial r}.
\end{aligned} \tag{14}$$

Для проведений численных расчетов важной является недивергентная форма уравнения переноса. Она позволяет использовать метод характеристик и численные схемы, использованные автором при расчете параметров течения в прямом канале [1].

Было получено уравнение переноса “вихря” ω в недивергентной форме:

$$\frac{D\omega}{Dt} = \frac{\partial\omega}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial\left(v_\varphi \cdot \omega\right)}{\partial\varphi} + \frac{\partial\left(v_r \cdot \omega\right)}{\partial r}. \tag{15}$$

Полученное уравнение (15) не учитывает диссипативные силы, связанные, в случае течения вязко -пластической жидкости, с силами вязкого трения. Для получения источниковых членов в нем были использованы уравнения (1)-(2), в предположении, что вязкость жидкости η не меняется по пространству и времени. Это приводит (для безразмерных координат) к формуле

$$\Phi_\omega \equiv \frac{1}{Re}\left[\frac{\partial^2\omega}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial\omega}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\omega}{\partial\varphi^2}\right] \equiv \Delta\omega. \tag{16}$$

Выражения для тензора напряжений (4) в цилиндрических координатах использовались для получения диссипативной части уравнения переноса “вихря” в виде:

$$\Phi_\omega = \Delta(\eta\cdot\omega) + \tilde{\Phi}_\omega.$$

Такая форма диссипативного члена обусловлена тем, что с помощью нее можно построить численную схему, в которой большая часть составляющих вычисляется на новом временном слое. В ходе численных расчетов было выяснено, что при этом решение обладает большей устойчивостью, что позволяет брать больший шаг по времени; скорость расчета возрастает.

Таким образом, получена диссипативная составляющая уравнения переноса в цилиндрических координатах:

$$\Phi_\omega = \Delta(\eta\cdot\omega) - \frac{4}{r^2}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi\partial r}\cdot\left(\frac{1}{r}\cdot\frac{\partial\eta}{\partial\varphi} - \frac{\partial^2\eta}{\partial\varphi\partial r}\right) - \frac{2}{r}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}\cdot\left(\frac{\partial\eta}{\partial r} + \frac{1}{r}\cdot\frac{\partial^2\eta}{\partial\varphi^2}\right) -$$
$$-\frac{2}{r}\cdot\frac{\partial^2\eta}{\partial r^2}\cdot\left(\frac{1}{r}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial\psi}{\partial r}\right). \tag{17}$$

Необходимо отметить, что знаки перед слагаемыми в формуле (17) могут меняться, в зависимости от предполагаемого положительного направления “завихренности” ω.

Для расчета параметров течения в изогнутом канале, с учетом реологической модели Пауэлла - Эйринга, необходимо записать уравнение энергии в полярных координатах. Воспользуемся общей формулировкой уравнения энергии для полярных координат [7]:

$$\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{v_\varphi}{r}\frac{\partial T}{\partial \varphi}+v_r\frac{\partial T}{\partial r}=-\frac{1}{r}\frac{\partial q_\varphi}{\partial \varphi}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\cdot q_r)ight]+S_{\varphi\varphi}\frac{1}{r}\left(\frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi}+v_r\right)+$$
$$+S_{r\varphi}\left[r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_\varphi}{r}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial v_r}{\partial \varphi}\right]+S_{rr}\frac{\partial v_r}{\partial r}, \quad (18)$$

где $q_\varphi=-\frac{1}{Pe}\cdot\frac{1}{r}\cdot\frac{\partial T}{\partial \varphi}$, $q_r=-\frac{1}{Pe}\cdot\frac{\partial T}{\partial r}$ – компоненты вектора плотности $\vec{q}$ энергии (в соответствии с законом Фурье).

С учетом соотношений для тензора напряжений (4) и переходя к недивергентной форме записи уравнения энергии, получим

$$\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{1}{r}\frac{\partial(v_\varphi\cdot T)}{\partial \varphi}+\frac{\partial(v_r\cdot T)}{\partial r}+\frac{v_r\cdot T}{r}=\frac{1}{Pe}\Delta T+\eta\cdot\Phi_T, \quad (19)$$

где диссипативная функция, определяющая рассеяние механической энергии движения жидкости и переход ее в тепловую, вычисляется как

$$\Phi_T=2\left[\frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi}+v_r\right)^2+\left(\frac{\partial v_r}{\partial r}\right)^2\right]+\left[r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v_\varphi}{r}\right)+\frac{1}{r}\frac{\partial v_r}{\partial \varphi}\right]^2. \quad (20)$$

Очевидно, что для переменной и постоянной вязкости уравнение энергии имеет один и тот же вид (в предположении, что остальные свойства среды постоянны по всей области интегрирования).

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

В качестве расчетной области рассматривалась изогнутую часть канала (рис.1), которая на практике может представлять собой колено трубопровода, соединяющего два участка трубы. Наиболее интересный случай представляет вариант, когда происходит охлаждение жидкости на искривленном участке канала. При этом, помимо вихревых образований в течении, снижающих скоростные характеристики потока, возникают дополнительные потери энергии при транспортировке жидкости из-за охлаждения жидкости и повышения вязкостных характеристик среды.

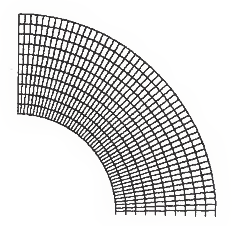


Рис 1. Расчетная сетка для моделирования течения в изогнутом канале

При тестовых численных расчетов было выявлено, что границы изогнутой части канала являются источником интенсивных возмущений, поэтому расчет параметров движущейся среды целесообразно проводить с присоединением к изгибу прямолинейных участков (рис.2).

Прямые участки канала являются продолжением искривленной области интегрирования с обоих торцов. Как видно из иллюстрации, в этом случае границы расчетной области достаточно удалены от колена, и возмущения, возникающие в потоке при его прохождении, слабо сказываются на входном и выходном участках трубы.

Конечно-разностный аналог уравнения переноса "вихря" ω запишется следующим образом:

$$\frac{\omega_{ij}^{n+1}-\omega_{ij}^{n}}{\Delta t}+Ł_{\varphi}^{1}\omega\Big|_{ij}+Ł_{r}^{1}\omega\Big|_{ij}=\frac{1}{Re}\left[Ł_{\varphi}^{2}\omega\Big|_{ij}+Ł_{\varphi}^{2}\omega\Big|_{ij}\right], \qquad (21)$$

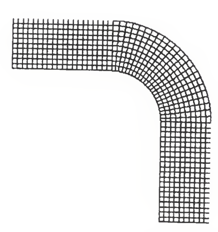


Рис.2. Расчетная сетка для моделирования течения в изогнутом канале

где

$$Ł_{\varphi}^{1}\omega\Big|_{ij} = \frac{1}{r_i \Delta\varphi}\left[\alpha_{ij}^{11}\cdot\omega_{ij} + \alpha_{ij}^{12}\cdot\omega_{i+1,j} - \alpha_{ij}^{21}\cdot\omega_{i-1\,j} - \alpha_{ij}^{22}\cdot\omega_{ij}\right], \quad (22)$$

$$Ł_{r}^{1}\omega\Big|_{ij} = \frac{1}{\Delta r}\left[\beta_{ij}^{11}\cdot\omega_{ij} + \beta_{ij}^{12}\cdot\omega_{ij+1} - \beta_{ij}^{21}\cdot\omega_{ij-1} - \beta_{ij}^{22}\cdot\omega_{ij}\right], \quad (23)$$

$$Ł_{\varphi}^{2}\omega\Big|_{ij} = \frac{1}{r_i^2 \Delta\varphi^2}\left[\omega_{i+1\,j} - 2\cdot\omega_{ij} + \omega_{i-1\,j}\right], \quad (24)$$

$$Ł_{r}^{2}\omega\Big|_{ij} = \frac{\omega_{ij+1} - \omega_{ij-1}}{r_i \Delta r} + \frac{1}{\Delta r^2}\left[\omega_{ij+1} - 2\cdot\omega_{ij} + \omega_{ij-1}\right]. \quad (25)$$

В представленных зависимостях (22) и (23) величины α_{ij} и β_{ij} - характеристики компонент скорости (v_φ и v_r, соответственно) через грани контрольного объема [5,6]. С учетом данных характеристик, частные производные по пространству, стоящие в конвективной части уравнения переноса, вычисляются с учетом направления движения жидкости. Это делает смысл конечно-разностного уравнения (21) более физическим, по сравнению с использованием центральных разностей при вычислении частных производных $\frac{\partial v_\varphi \cdot F}{\partial \varphi}$ и $\frac{\partial v_r \cdot F}{\partial r}$.

Для решения системы линейных алгебраических уравнений, получаемой при использовании численной схемы (21), воспользуемся процедурой ADI (Alternative Directions Implicit) [2]. В соответствии с данным методом, разобьем задачу на три временных слоя: $n, n+\frac{1}{2}, n+1$, - а также разделим тангенциальное и радиальное направления:

$$\omega_{ij}^{n+\frac{1}{2}} + \Delta t\, Ł_{\varphi}^{1}\omega\Big|_{ij}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{Re} Ł_{\varphi}^{2}\omega\Big|_{ij}^{n+\frac{1}{2}} = \omega_{ij}^{n}, \quad (26)$$

$$\omega_{ij}^{n+1} + \Delta t\, Ł_{r}^{1}\omega\Big|_{ij}^{n+1} - \frac{\Delta t}{Re} Ł_{r}^{2}\omega\Big|_{ij}^{n+1} = \omega_{ij}^{n+\frac{1}{2}}. \quad (27)$$

В результате получим две трехдиагональные системы уравнений вида

$$a_i^{\varphi}\cdot\omega_{i+1,j} + b_i^{\varphi}\cdot\omega_{ij} + c_i^{\varphi}\cdot\omega_{i-1,j} = f_i^{\varphi}, \quad (28)$$

$$a_j^{r}\cdot\omega_{ij+1} + b_j^{r}\cdot\omega_{ij} + c_j^{r}\cdot\omega_{ij-1} = f_j^{r}, \quad (29)$$

где

$$\begin{cases} a_i^{\varphi} & = & \dfrac{\Delta t}{r_j \Delta\varphi}\alpha_{ij}^{12} - \dfrac{1}{Re}\dfrac{\Delta t}{r_j^2 \Delta\varphi^2}, \\ b_i^{\varphi} & = & 1+\dfrac{\Delta t}{r_j \Delta\varphi}(\alpha_{ij}^{11}-\alpha_{ij}^{22})+\dfrac{2}{Re}\dfrac{\Delta t}{r_j^2 \Delta\varphi^2}, \\ c_i^{\varphi} & = & -\dfrac{\Delta t}{r_j \Delta\varphi}\alpha_{ij}^{21} - \dfrac{1}{Re}\dfrac{\Delta t}{r_j^2 \Delta\varphi^2}, \\ f_i^{\varphi} & = & \omega_{ij}^{n}, \end{cases} \tag{30}$$

– коэффициенты трехдиагональной матрицы при разложении уравнения переноса ω вдоль тангенциальной направляющей φ;

$$\begin{cases} a_j^{r} & = & \dfrac{\Delta t}{\Delta r}\beta_{ij}^{12} - \dfrac{1}{Re}\dfrac{\Delta t}{\Delta r^2} - \dfrac{1}{2\cdot Re}\dfrac{\Delta t}{r_j \Delta r}, \\ b_j^{r} & = & 1+\dfrac{\Delta t}{r_j \Delta\varphi}(\beta_{ij}^{11}-\beta_{ij}^{22})+\dfrac{2}{Re}\dfrac{\Delta t}{r_j^2 \Delta\varphi^2}, \\ c_j^{r} & = & -\dfrac{\Delta t}{\Delta r}\beta_{ij}^{21} - \dfrac{1}{Re}\dfrac{\Delta t}{\Delta r^2} + \dfrac{1}{2\cdot Re}\dfrac{\Delta t}{r_j \Delta r}, \\ f_j^{r} & = & \omega_{ij}^{n+\frac{1}{2}}, \end{cases} \tag{31}$$

– коэффициенты трехдиагональной матрицы при разложении уравнения переноса ω вдоль радиальной координаты направляющей r.

Полученные трехдиагональные системы конечно-разностных уравнений (28),(29) решаются методом “прогонки” [5,6], описанным ранее.

Уравнение Пуассона (13), связывающее “завихренность” ω с “функцией тока” в полярных координатах, можно представить в конечно-разностном виде, используя центральные разности. Данные аппроксимации частных производных дают второй порядок точности по пространству.

$$\frac{1}{r_j \Delta r}\left[\psi_{ij+1}-\psi_{ij-1}\right]+\frac{1}{\Delta r^2}\left[\psi_{ij+1}-2\cdot\psi_{ij}+\psi_{ij-1}\right]+\frac{1}{r_j^2\Delta\varphi^2}\left[\psi_{i+1j}-2\cdot\psi_{ij}+\psi_{i-1j}\right]=\omega_{ij}. \tag{32}$$

Решение системы линейных алгебраических уравнений выполнено методом последовательной верхней релаксации [2,5,6]. Для этого, предварительно сгруппировав соответствующие слагаемые, приведем равенство (32) к виду

$$\psi_{ij}=\frac{1}{2\cdot(\beta_j^2+1)}\cdot\left[\psi_{i+1j}+\psi_{i-1j}+(\beta_j^2+\alpha_j)\cdot\psi_{ij+1}+(\beta_j^2-\alpha_j)\cdot\psi_{ij-1}-4\alpha_j^2\omega_{ij}\right], \tag{33}$$

где коэффициенты α_j, β_j вычисляются как $\alpha_j = \frac{1}{2} r_j \cdot \Delta\varphi, \quad \beta_j = \frac{r_j \cdot \Delta\varphi}{\Delta r}$.

Сложим правую часть равенства (33) с тождеством $\tilde{\psi}_{ij} - \psi_{ij} \equiv 0$ и перегруппируем слагаемые

$$\tilde{\psi}_{ij} = \psi_{ij} + \frac{1}{2 \cdot (\beta_j^2 + 1)} \cdot \Big[\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j} + (\beta_j^2 + \alpha_j) \cdot \psi_{ij+1} + $$
$$+ (\beta_j^2 - \alpha_j) \cdot \psi_{ij-1} - 4\alpha_j^2 \omega_{ij} - 2(\beta_j^2 + 1) \cdot \psi_{ij} \Big]. \tag{34}$$

В итоге, предполагая, что в ячейках с индексами $i-1$ и $j-1$ значения известны на новом $n+1$ временном слое, получим

$$\psi_{ij}^{n+1} = \psi_{ij}^{n} + \frac{\tau}{2 \cdot (\beta_j^2 + 1)} \cdot \Big[\psi_{i+1j}^{n} + \psi_{i-1j}^{n+1} + (\beta_j^2 + \alpha_j) \cdot \psi_{ij+1}^{n} + $$
$$+ (\beta_j^2 - \alpha_j) \cdot \psi_{ij-1}^{n+1} - 4\alpha_j^2 \omega_{ij}^{n+1} - 2(\beta_j^2 + 1) \cdot \psi_{ij}^{n} \Big], \tag{35}$$

где τ – релаксационный параметр, для которого выполняется условие: $0 < \tau \le 2$.

Неявная схема обладает лучшей сходимостью при решении уравнений, описывающих движение сред со сложной реологией (рис.3).

Если использовать численную схему для недивергентной формы уравнения переноса вихря, то, как показали численные расчеты, погрешность такой схемы достаточно велика, а ошибка вычислений быстро накапливается. Схема обладает слабой устойчивостью, что требует уменьшения используемого шага по времени, а

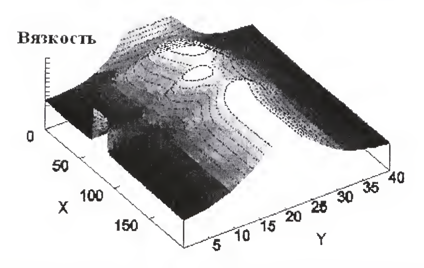


Рис 3. Реологическая поверхность, описывающая поведение псевдопластической жидкости

полученные результаты не соответствуют физической природе процессов. Так, например, в области повышенной вязкости возникает источник движения, решение теряет устойчивость, что приводит к "аварийному" завершению расчетов.

Для расчета течения по составной трубе потребовалась стыковка уравнения переноса "вихря" на границе участков. Сравним формулы для "завихренности" ω в декартовых и полярных координатах:

$$\omega_{\text{декарт.}} = \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x}, \quad \omega_{\text{поляр.}} = \frac{\partial v_\varphi}{\partial r} + \frac{v_\varphi}{r} - \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial v_r}{\partial \varphi}.$$

По размерности обе величины совпадают, а с учетом того, что указанные части канала стыкуются под прямым углом, на граничной области $v_\varphi \equiv u, \quad v_r \equiv v$. Также, при выборе достаточно маленьких пространственных шагов расчетной сетки $\Delta x, \Delta y, \Delta\varphi и \Delta r$ в пределе будут выполняться соотношения $r \cdot \Delta\varphi \to \Delta x, \quad \Delta y = \Delta r$. Тогда очевидно, что основной вклад в выражении $\Delta\omega = \omega_{\text{поляр.}} - \omega_{\text{декарт.}}$, основываясь на (36), будет составлять v_φ / r. Введем обозначение новой функции $\bar{\omega}$

$$\bar{\omega} = \omega_{\text{поляр.}} - \delta, \quad \text{где } \delta = \frac{v_\varphi}{r}, \tag{37}$$

которой соответствует новое уравнение переноса

$$\frac{\partial \bar{\omega}}{\partial t} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial v_\varphi \cdot \bar{\omega}}{\partial \varphi} + \frac{\partial v_r \cdot \bar{\omega}}{\partial r} = \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 \eta \cdot \bar{\omega}}{\partial} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \eta \cdot \bar{\omega}}{\partial} + \; + \frac{\partial^2 \eta \cdot \bar{\omega}}{\partial r^2} + \Phi_\omega + G_{\bar{\omega}}, \tag{38}$$

где диссипативная функция Φ_ω вычисляется с помощью соотношения (17), а $G_{\bar{\omega}}$ определяется как

$$G_{\bar{\omega}} = -\left[\frac{\partial \delta}{\partial t} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial v_\varphi \cdot \delta}{\partial \varphi} + \frac{\partial v_r \cdot \delta}{\partial r} - \; - \left(\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2 \eta \cdot \delta}{\partial} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \eta \cdot \delta}{\partial} + \frac{\partial^2 \eta \cdot \delta}{\partial r^2} \right) \right]. \tag{39}$$

С помощью формул (37)-(39) проведена серия расчетов, как с учетом постоянной вязкости среды (рис.5), так и при наличии зоны охлаждения и повышении вязких свойств жидкости (рис.6).

На основе экспериментальных данных известно [8], что при течении вязкой жидкости по составному каналу (рис.2), возникают вихревые течения. Их форма, направление движения и области образования отображены на рис.4.

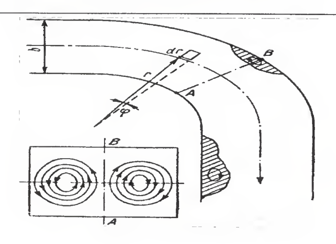


Рис. 4. Возникновение вихревых течений при движении жидкости по изогнутому каналу

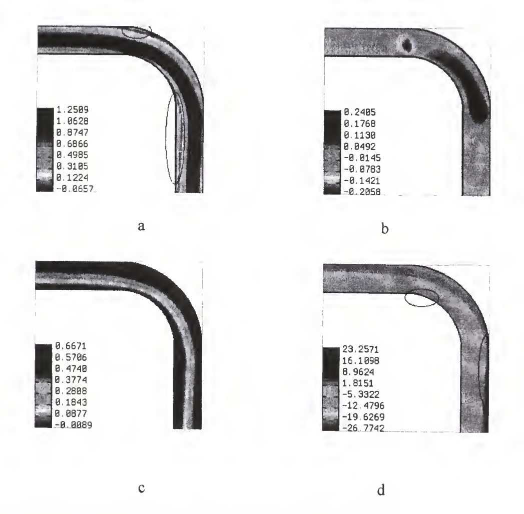


Рис. 5. Течение в изогнутом канале при постоянной вязкости

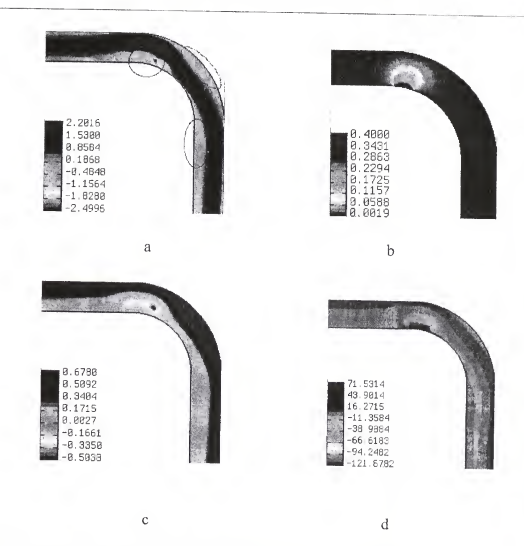


Рис. 6. Течение в изогнутом канале при наличии скачка вязкости

Данное явление наблюдается и в численном эксперименте (рис.5): обратное течение возникает на входе в изогнутую часть трубы и на некотором расстоянии от выхода жидкости из данного участка. Области обведены на рисунке.

Для расчета течения вязкой жидкости в изогнутом канале границы расчетной области принимались достаточно удаленными (порядка 5-6 поперечных размеров канала) от изогнутой части. Это условие использовалось для того, чтобы вихревые зоны, образующиеся в потоке, не оказывали существенного влияния на выходные границы канала.

Расчеты проводились так же, как и в задаче течения жидкости по прямому каналу, при числе Рейнольдса $Re = 10$ в невозмущенном потоке, а в локальных областях вязкость η увеличивалась до 50 раз.

В случае постоянной вязкости (рис.5) поток жидкости, входящий по прямому участку канала в изогнутый, “прилипает” к нижней стенке. В результате, в верхней час-

ти образуется "разряженная" зона с вихревым течением. Далее, под действием центростремительной силы, поток жидкости отклоняется к верхней стенке канала, и на выходе из изогнутой части образуется "теневая зона", вблизи внутренней твердой поверхности с циркуляционным течением.

Наибольшие энергетические потери, связанные с вязким трением, наблюдаются в потоке в областях, отмеченных сплошными линиями на графике распределения "завихренности" ω (рис.5(c)).

Течения с локальными областями изменения вязкости в изогнутом канале обладают еще более сложной структурой (см. рис. 6). На графике (b) данного рисунка показано распределение вязкости в случае охлаждения участка нижней твердой границы на входе в "колено". Встречая вязкую "преграду", поток отклоняется к верней стенке. Также как и в случае с течением в прямом канале, наблюдается явление "биения струи". Эффект данного явления усиливается появлением третьей вихревой зоны (на выходе из изогнутого участка). Она представляет собой развившуюся циркуляционную область при течении жидкости с постоянной вязкостью за счет дополнительных "колебательных" движений основного ядра потока.

Видно, что силы вязкого трения достигают максимального значения на границах области повышенной вязкости, что отображено на рис. 6(c).

При возникновении скачка вязкости в изогнутом канале наблюдается большее число областей с вихревым движением (по сравнению с потоком, проходящим через прямой канал). В случае течения с постоянной вязкостью образуется две циркуляционные области, а при локальном увеличении вязкости их число увеличивается до трех. Это явление связано с тем, что помимо сил вязкого трения, создающих дополнительное сопротивление в области охлаждения жидкости, поток, устремляющийся к стенке канала под действием центростремительной силы, "отражается" от твердой границы. В результате образуется "зона подсоса", обусловливающая появление вихря.

Образование дополнительных вторичных и третичных циркуляционных течений при движении вязкой жидкости по трубам сложной формы приводит к дополнительным энергетическим потерям при транспортировке высоковязкой среды: возрастает градиент давления вдоль канала; как следствие – снижается расход жидкости. На основе построенной методики можно исследовать, как повышение вязкости среды повлияет на картину течения и как, например, за счет установки дополнительных нагревательных элементов, можно бороться с вихревыми образованиями в потоке.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Липанов А.М., Вахрушев А.А., Вахрушев А.В. Математическое моделирование течения жидкости с переменной структурой // Химическая физика и мезоскопия. – 2005. Т7. N1. – С.23-30.
2. Андерсон Д., Таннехилл Дж., Плетчер Р. Вычислительная гидромеханика и теплообмен: В 2т. Т.2 – М.: Мир, 1990. – 392с.
3. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей. В 2-х т. – М.: Мир, 1991. – Т.1 – 502с. Т.2 – 552с.
4. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М.: Наука, 1973. – 848с.
5. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. – М.: Энергоиздат, 1984. – 150 с.
6. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. – М.: Мир, 1980. – 616с.
7. Слеттери Дж. С. Теория переноса импульса, энергии и массы в сплошных средах. – М.: Энергия, 1978. – 448с.
8. Повх И.Л. Техническая гидродинамика. 2-е изд. – Л.: Машиностроение, 1976. –504 с.

SUMMARY. Simulation of non-Newtonian 2-D flows in bended channels has been considered. Numerical calculations of pseudo-plastic medium parameters were carried out using Paule - Eyring rheological model. Physical processes into account occurring due to local change of channel wall temperature were taken.

УДК 539.3:621.454.3.004.82

О КРИТЕРИИ БЕЗОПАСНОГО СЖИГАНИЯ ДЕФЕКТНЫХ ЗАРЯДОВ ТВЕРДОГО ТОПЛИВА ПРИ ПОНИЖЕННЫХ ДАВЛЕНИЯХ

Д.А.ПОСПЕЛОВ, В.Ю.МЕЛЕШКО, П.Н.НАУМОВ, Г.Я.ПАВЛОВЕЦ

Военная академия РВСН имени Петра Великого, Москва, Россия

АННОТАЦИЯ. Рассмотрены дефекты твердотопливных зарядов снимаемых с вооружения ракет, влияющие на процесс сжигания. Предложены критерии, позволяющие оценить влияние дефектов заряда на увеличение поверхности горения и расхода продуктов сгорания. Определены условия, при которых растрескивание внутренней поверхности заряда можно считать не опасным для его утилизации.

К настоящему времени можно считать очевидным, что утилизацию зарядов твердого ракетного топлива приходится осуществлять при условии наличия в зарядах дефектов в виде трещин и отслоений, локализованных в различных местах конструкции. При этом накопленный опыт сжигания таких зарядов без соплового блока (давление в камере, как правило, не превышает 1МПа) на специальном стенде показал следующее:

- чисто механического опасного развития дефектов в процессе горения при давлении в камере сгорания порядка 1МПа не наблюдалось;
- поверхности горения с обнаруженными отслоениями заряда от корпуса могут быть флегматизированы - пропитаны специальными составами, предотвращающими воспламенение дополнительной свободной поверхности при горении заряда в процессе утилизации, механического разрушения зарядов от действия внутреннего давления при этом также не происходило;
- при горении заряда могут возникать скачки расхода продуктов сгорания, что является опасным как с точки зрения сохранения работоспособности самого стенда, так и соответствия работы стенда экологическим требованиям. Такого типа явления могут быть вызваны образованием дополнительной поверхности горения вследствие растрескивания топлива при действии на заряд внутреннего давления и воспламенения топлива по внутренней поверхности образованных полостей.

Последнее наблюдение представляется достаточно опасным и делает необходимым выбор приемлемого исходного критерия безопасной утилизации дефектного заряда методом бессоплового сжигания. Такой критерий может быть выбран на основе ограничения величины образуемой при горении топлива дополнительной поверхности горения:

$$\frac{\Delta S}{S} \le \left(\frac{\Delta S}{S} \right)_{\max},$$

где S - площадь поверхности горения;

ΔS - дополнительная поверхность горения на канале заряда за счет проникновения пламени в полости дефектов [1].

При действии внутреннего давления на жестко скрепленный с корпусом заряд основную нагрузку принимает на себя корпус (подкрепляющее действие заряда составляет величины порядка нескольких процентов), поэтому в первом приближении можно считать поле деформаций в заряде заданным. Считая деформации заряда малыми, поле деформаций плоским, а материал несжимаемым из решения задачи Ляме получим зависимость тангенциальной деформации ε от радиуса r:

$$\varepsilon(r) = \varepsilon_{\kappa} \frac{a^2}{r^2}, \tag{1}$$

где $\varepsilon_к$ - тангенциальная деформация корпуса;

a - радиус корпуса.

При длительном хранении заряда твердое топливо существенно и неоднородно охрупчивается, причем деформативность топлива $\varepsilon_{пред}$ тем меньше, чем ближе выбранная область к поверхности канала. Примем, что при действии внутреннего давления (т.е. при задании деформации корпуса) радиальные поверхностные трещины достигнут вершинами некоторого радиуса r_0, такого, что

$$\varepsilon(r_0) = \varepsilon_{пред}(r_0). \tag{2}$$

Условия (1) и (2) задают некоторое алгебраическое уравнение для определения величины r_0:

$$\varepsilon_{пред}(r_0) = \varepsilon_{\kappa} \frac{a^2}{r_0^2},$$

Если задать деформативность в вершине трещины получим:

$$r_0 = a\sqrt{\frac{\varepsilon_{\kappa}}{\varepsilon_{пред}}}.$$

В этом случае при $b > r_0$ величина глубины трещин $l_{тр}$ примет значение

$$l_{mp} = r_0 - b = b\left(\sqrt{\frac{\varepsilon_{\kappa}}{\varepsilon_{npe\partial}}\frac{a}{b}} - 1\right),$$

где b - внутренний радиус канала.

Последнее соотношение представляет собой уравнение относительно неизвестной величины - глубины трещин l_{mp}, поскольку деформативность топлива $\varepsilon_{npe\partial}$ есть переменная величина: $\varepsilon_{npe\partial} = \varepsilon_{npe\partial}(r_0)$, т.е. $\varepsilon_{npe\partial} = \varepsilon_{npe\partial}(l_{mp})$. Рассмотрим два предельных случая: когда трещина расположена вблизи поверхности и величина $\varepsilon_{npe\partial}$ почти постоянна, и когда глубина трещины совпадает с глубиной приповерхностного охрупчивания топлива.

Первый случай (трещина расположена вблизи поверхности)

Величина раскрытия трещин в основании (на внутренней поверхности канала) может быть оценена, если известно количество трещин. Пусть N — количество трещин, $\varepsilon_{npe\partial}(b)$ - деформативность топлива на внутреннем канале (примем, что в области растрескивания заряда она известна), тогда величина раскрытия δ определяется из соотношения

$$\delta = \frac{2\pi b}{N}\left(\varepsilon_{\kappa}\frac{a^2}{b^2} - \varepsilon_{npe\partial}(b)\right). \qquad (3)$$

Таким образом, из соотношений (1;2;3) можно определить отношение параметра $\frac{l_{mp}}{\delta}$, который является основным при оценке как возможности воспламенения внутренней поверхности дефекта, так и лавинообразного роста давления в полости дефекта при условии горения топлива по внутренней поверхности дефекта [1;2].

Количество трещин можно оценить из энергетических соображений. Действительно, пусть материал в приповерхностном слое толщиной, равной протяженности трещины, разгрузился с выделением некоторой энергии ΔЭ, которая была затрачена на образование новой свободной поверхности ΔS_{mp} [3]. Пусть γ - удельная поверхностная энергия, тогда

$$\Delta S_{mp} = \frac{\Delta Э}{\gamma}. \qquad (4)$$

Зная общую площадь и глубину трещин легко оценить величину N - общее количество образовавшихся трещин.

Для оценки высвободившейся энергии ΔЭ примем, что в приповерхностном слое по внутреннему каналу заряда на глубину трещины деформация топлива после образо-

вания трещин остается на уровне предельного значения $\varepsilon_{пред}$. Тогда, в первом приближении, без учета трехмерности напряженно-деформированного состояния топлива величину энергии ΔЭ можно оценить из следующих соотношений:

$$\Delta Э = \iiint\limits_{V_{заряда}} E\frac{\varepsilon^2}{2}dV - E\frac{\varepsilon_{пред}{}^2}{2}2\pi b l_{тр} L,$$

где L - длина заряда, E - модуль Юнга.

С учетом зависимости (1),

$$\iiint\limits_{V_{заряда}} E\frac{\varepsilon^2}{2}dV = 2\pi LE\int\limits_{b-l_{тр}}^{b}\frac{\varepsilon_к{}^2 a^4}{2r^4}rdr = 2\pi LE\frac{\varepsilon_к{}^2 a^4}{2r^2}\frac{1}{2}\Bigg|_b^{b-l_{тр}} =$$

$$\pi LE\frac{\varepsilon_к{}^2 a^4}{2}\left(\frac{1}{\left(b-l_{тр}\right)^2}-\frac{1}{b^2}\right) \approx \frac{\pi LE\varepsilon_к{}^2 a^4}{b^4}l_{тр}b = \pi LE\varepsilon_к{}^2 l_{тр} b\frac{a^4}{b^4}.$$

Таким образом

$$\Delta Э \approx \pi b l_{тр} LE\left(\frac{a^4}{b^4}\varepsilon_к{}^2 - \varepsilon_{пред}{}^2\right). \tag{5}$$

Пусть k_ε - значение исходного коэффициента запаса заряда по деформативности, p_0 - расчетное значение внутреннего давления на канале при работе двигателя, p_y - максимальное давление в камере сгорания в процессе утилизации, а $\varepsilon^0_{пред}$ - деформативность «свежего» топлива, тогда из формул (4;5) следует

$$\frac{\Delta S_{тр}}{S} \approx \frac{L\pi E b l_{тр}}{\gamma 2\pi b L}\left(\left(\frac{\varepsilon^0_{пред}}{k_\varepsilon}\frac{p_y}{p_0}\right)^2 - \varepsilon_{пред}{}^2\right) =$$
$$= \frac{El_{тр}\varepsilon^0_{пред}}{2\gamma}\left(\sqrt{\frac{\varepsilon^0_{пред}}{k_\varepsilon\varepsilon_{пред}}\frac{p_y}{p_0}}-1\right)\left(\left(\frac{p_y}{k_\varepsilon p_0}\right)^2 - \left(\frac{\varepsilon_{пред}}{\varepsilon^0_{пред}}\right)^2\right). \tag{6}$$

Из полученной формулы видна асимптотика роста относительной величины дополнительной площади горения - величины $\frac{\Delta S_{тр}}{S}$ с уменьшением относительной деформативности топлива - величины $\frac{\varepsilon_{пред}}{\varepsilon^0_{пред}}$.

Формула (6) позволяет оценить предельные значения глубин трещин $l_{тр}$, при которых уровни увеличения расхода допустимы, т.е. стенд «справится» с дополнительными выбросами продуктов сгорания.

Пусть χ - предельное значение относительного приращения расхода продуктов сгорания. Тогда

$$\frac{\Delta S_{тр}}{S} \le \chi,$$

следовательно,

$$l_{тр} \le \frac{2\gamma\chi}{E\varepsilon^0_{пред}\left(\sqrt{\frac{\varepsilon^0_{пред}}{k_\varepsilon \varepsilon_{пред}}\frac{p_y}{p_0}}-1\right)\left(\left(\frac{p_y}{k_\varepsilon p_0}\right)^2-\left(\frac{\varepsilon_{пред}}{\varepsilon^0_{пред}}\right)^2\right)}.$$

С другой стороны, величину свободной поверхности $\Delta S_{тр}$ можно оценить из соотношения

$$\Delta S_{тр} = 2NLl_{тр}.$$

Полученное соотношение с учетом формул (3) и (6) позволяет оценить степень раскрытия трещин в вершине

$$\delta \approx 2\frac{2\gamma\left(\varepsilon_к \frac{a^2}{b^2}-\varepsilon_{пред}\right)}{E\left(\frac{a^4}{b^4}\varepsilon_к{}^2-\varepsilon_{пред}{}^2\right)} = \frac{4\gamma}{E\left(\frac{a^2}{b^2}\varepsilon_к+\varepsilon_{пред}\right)}. \quad (7)$$

Второй случай (глубина трещины совпадает с глубиной приповерхностного охрупчивания топлива)

Пусть h - глубина охрупчивания топлива, $l_{тр} = h$. Тогда

$$\delta = \frac{2\pi b}{N}\varepsilon_к \frac{a^2}{b^2}\left(1-\frac{b^2}{(b+h)^2}\right) \approx \frac{4\pi h}{N}\varepsilon_к \frac{a^2}{b^2}. \quad (8)$$

В первом приближении

$$\Delta Э = \frac{E\varepsilon_к{}^2}{2}\frac{a^4}{b^4}\left(1-\frac{b^4}{(b+h)^4}\right)2\pi bLh \approx 2E\varepsilon_к{}^2\frac{a^4}{b^4}\frac{h}{b}2\pi bLh.$$

Аналогично первому случаю оценивается абсолютное приращение площади

$$\Delta S = \frac{2E\varepsilon_{\kappa}^{2}}{\gamma}\frac{a^4}{b^4}\frac{h}{b}2\pi bLh$$

и относительное приращение площади

$$\frac{\Delta S}{S} = \frac{2Eb\varepsilon_{\kappa}^{2}}{\gamma}\frac{a^4}{b^4}\frac{h^2}{b^2}.$$

Последнее соотношение позволяет оценить асимптотику роста дополнительной площади горения с ростом глубины охрупчивания топлива. К сожалению, получение априорных прогнозов по значениям физико-механических характеристик «свежих» материалов или искусственно состаренных достаточно проблематично. Есть основания полагать, что и величина удельной поверхностной энергии γ также существенно уменьшается в процессе охрупчивания топлива, как и снижается деформативность. Если учесть, что модуль Юнга может расти, то легко заметить, что все указанные процессы приводят к росту оценки дополнительной площади горения ΔS.

Зная величину приращения площади за счет трещин, можно оценить количество трещин

$$N = \frac{\frac{2E\varepsilon_{\kappa}^{2}}{\gamma}\frac{a^4}{b^4}\frac{h}{b}2\pi bLh}{2Lh} = \frac{2\pi Eh\varepsilon_{\kappa}^{2}}{\gamma}\frac{a^4}{b^4}.$$

Зная количество трещин, из соотношения (8) можно оценить величину раскрытия трещины в вершине:

$$\delta = \frac{4\pi h}{N}\varepsilon_{\kappa}\frac{a^2}{b^2} = \frac{4\pi h\varepsilon_{\kappa}\frac{a^2}{b^2}}{\frac{2\pi Eh\varepsilon_{\kappa}^{2}}{\gamma}\frac{a^4}{b^4}} = \frac{2\gamma}{E\varepsilon_{\kappa}}\frac{b^2}{a^2}. \quad (9)$$

Оценка (9) является нижней, а оценка (7) - верхней.

Таким образом, полученные соотношения позволяют оценить уровни площади дополнительной свободной поверхности, образованной за счет растрескивания топлива по поверхности внутреннего канала заряда. При выполнении известных условий [1;2], эта поверхность станет дополнительной поверхностью горения, что увеличит расход продуктов сгорания. Зная длину трещины и отношение $\frac{l_{mp}}{\delta}$, можно определить следующее:

1) Произойдет ли воспламенение внутренней поверхности трещин до выгорания топлива на глубину трещины, т.е. следует ли считать увеличение поверхности горения на величину ΔS_{mp}, для чего оценивается $\delta_{\min}$ - величина минимального раскрытия дефектов, при которых достигается на поверхности в полости дефектов температура воспламенения

$$\delta_{\min} = 8l_{mp} \cdot \sqrt{\frac{\rho_{т} c \lambda u}{h}} \cdot \frac{T_{в} - T_{н}}{1 - \sqrt{\frac{T_{в}}{T_0}}} \cdot \frac{1}{p_0 \mathrm{v}_0},$$

где ρ_m - плотность топлива;

c - теплоемкость топлива;

λ - теплопроводность топлива;

a - коэффициент температуропроводности;

$T_н$ - начальная температура заряда;

$T_в$ -температура воспламенения;

$\frac{R}{\mu}$ - газовая постоянная смеси продуктов сгорания;

u - скорость горения топлива;

v_0 - средняя скорость молекул в камере сгорания;

p_0 - давление в камере сгорания [3].

2) Произойдет ли лавинообразное развитие дефекта вследствие роста давления в полости трещины [1], для чего оценивается максимальный уровень относительного давления $\left(\frac{p}{p_0}\right)_{\max}$ в полости дефекта:

$$\left(\frac{p}{p_0}\right)_{\max} \approx 1 + \frac{S}{F}\sqrt{\frac{RT}{\mu}}\frac{\rho_{т} u}{c_1 p_0},$$

где S - площадь внутренней поверхности трещины;

F - площадь поперечного сечения трещины в месте ее выхода на воспламененную поверхность,

c_1 - числовой коэффициент [3].

В том случае, если

а) воспламенение внутренней поверхности трещин до выгорания топлива на глубину трещины не происходит [2],

b) максимальный уровень относительного давления $\left(\frac{p}{p_0}\right)_{max}$ в полости дефекта не превышает предельно допустимого значения [1],

c) величина образуемой при горении топлива дополнительной поверхности горения: $\frac{\Delta S}{S}$ не превышает допускаемый характеристиками стенда уровень относительного превышения расхода,

то растрескивание внутренней поверхности заряда можно считать не опасным для его утилизации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Поспелов Д. А., Мелешко В. Ю. К вопросу о безопасной утилизации методом бессоплового сжигания зарядов твердого топлива с дефектами. - Химическая физика, 2004, том 23, №3. С.45-48.
2. Поспелов Д. А., Мелешко В. Ю., Наумов П. Н. Оценка предельных размеров дефектов в зарядах твердого топлива при их утилизации методом бессоплового сжигания. Известия РАРАН, 2004, выпуск 2(39). С.79-82.
3. Нотт Дж. Ф. Основы механики разрушения. - М.: Металлургия. 1978. С.94-99.

SUMMARY. Surface defects of solid propellant charge of annihilable rockets which affect on incineration process are examined. The criteria for estimation of surface defects influence on increasing of combustion surface are proposed. The conditions of safety incineration of solid propellant charge with cracked surface are defined.

УДК 539.2: 544.723

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И ВЫДЕЛЕНИЯ ВОДОРОДА ФУЛЛЕРЕНАМИ И ФУЛЛЕРИТАМИ

А.М. ЛИПАНОВ, А.В. ВАХРУШЕВ, М.В. СУЕТИН, А.А. ВАХРУШЕВ

Институт прикладной механики УрО РАН, Ижевск, Россия

АННОТАЦИЯ. Методом молекулярной динамики выполнены расчеты адсорбции, хранения и десорбции водорода фуллеренами C_{20}, C_{60}, C_{80}, C_{180}, C_{240} и C_{540} и сформированными из них фуллеритами при различных внешних условиях. Рассчитаны кинетика адсорбции молекул водорода фуллеренами; определены термодинамические параметры, необходимые для устойчивого хранения водорода фуллеренами; построена структура, образованная молекулами водорода на фуллеренах при хранении; определены термодинамические условия выделения водорода.

ВВЕДЕНИЕ

Поиски альтернативных источников энергии в связи с истощением природных запасов углеродных топлив и ухудшающейся экологией весьма актуальны в настоящее время. Водород, в этом смысле, является новым перспективным экологически чистым топливом. Для накопления водорода и его хранения используют различные устройства (аккумуляторы водорода) конструкции которых, несмотря на постоянное совершенствование, не позволяют достичь высокого весового содержания водорода. У промышленных аккумуляторов весовое содержание водорода не превышает 5-6 % [1]. В связи с этим, следует отметить, что для накопления водорода можно использовать аккумуляторы, созданные на основе наноструктурных элементов: фуллеренов, наночастиц, нанотрубок и т.д., - обладающих уникальными свойствами по удержанию различных газов [2,3]. В настоящее время в этом направлении проводится большое количество экспериментальных работ, но нет однозначности результатов вследствие применения различных методик проведения опытов. Кроме того, в большинстве случаев невозможно получить идентичные образцы наноструктур для исследования. Поэтому использование методов математического моделирования для проектирования и оптимизации структуры наноаккумуляторов водорода весьма актуально и перспективно[4-7].

В данной работе в развитие работ авторов [8-10] представлено моделирование методами молекулярной динамики процессов поглощения, хранения и выделения водо-

рода при различных внешних условиях фуллеренами C_{20}, C_{60}, C_{80}, C_{180}, C_{240} и C_{540} и сформированными из них фуллеритами. Рассчитаны кинетика процессов адсорбции молекул водорода фуллереном; определены термодинамические параметры, необходимые для устойчивого хранения водорода фуллереном; построена структура, образованная молекулами водорода вне фуллерена при хранении и рассчитаны термодинамические условия и кинетика выделения водорода,

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Для моделирования взаимодействия системы фуллеренов (фуллеритов) с водородом рассмотрим расчётную ячейку с периодическими граничными условиями (рис. 1).

Движение атомов данной наноструктуры определяется системой дифференциальных уравнений

$$m_i \frac{d^2 \bar{r}_i(t)}{d t^2} = \bar{F}_i(\bar{r}), \qquad i = 1,2,..,n, \qquad (1)$$

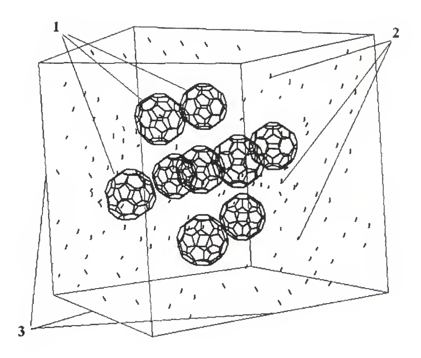


Рис. 1. Расчетная схема: 1 - фуллерены, 2 - молекулы водорода, 3 - ячейка с периодическими граничными условиями

при начальных условиях

$$t = 0, \bar{r}_i = \bar{r}_{i0}, \bar{V}_i = \bar{V}_{i0}, \quad \bar{r}_i \subset \Omega, \tag{2}$$

где n - число атомов, составляющих наносистему; m_i - масса i-го атома; $\bar{r}_{i0}, \bar{r}_i$ - начальные и текущие радиус - вектора i-го атома, соответственно; $\bar{F}_i(\bar{r})$ - суммарная сила, действующая на i-ый атом со стороны других атомов; Ω - область, занимаемая наносистемой (3); $\bar{V}_{i0}, V_i$ - начальная и текущая скорости i-го атома, соответственно.

На границах расчетной области (3), (рис. 1) задаются периодические граничные условия, согласно [11].

$\bar{F}_i(\bar{r})$ определяется соотношением:

$$\bar{F}_i(r) = -\frac{\partial E(\bar{r})}{\partial \bar{r}_i}, i = 1,2,...,n,, \tag{3}$$

где $\bar{r} = \{\bar{r}_1, \bar{r}_2, .., \bar{r}_n\}$; $E(\bar{r})$ - потенциал, зависящий от взаимного расположения всех атомов, описывающий связанные и несвязанные взаимодействия.

$$E(\bar{r}) = E_b + E_v + E_\varphi + E_{ej} + E_{LJ}, \tag{4}$$

где слагаемые отвечают следующим типам взаимодействий: E_b - химическим связям, E_v - валентным углам, E_φ - торсионным углам, E_{ej} - плоским группам и E_{LJ} - Ван - дер - Ваальсовым контактам.

Валентные длины поддерживаются за счёт потенциала:

$$E_b = \sum_{bonds} K_r (b - b_0)^4, \tag{5}$$

где K_r - константа растяжения связи; b_0 - равновесная длина связи; b - текущая длина связи.

Валентные углы задаются потенциалами

$$E_v = \sum_{angles} K_\theta (\theta - \theta_0)^4, \tag{6}$$

где K_θ - силовая константа изгиба; θ_0 - равновесная величина угла связи;

θ - текущая величина угла связи.

Энергия торсионных взаимодействий и плоских групп записывается в виде

$$E_{\varphi} = \sum_{\varphi} K_{\varphi}(1 + \cos(m\varphi - \delta))^4 , \quad (7)$$

где m – кратность торсионного барьера, δ - сдвиг фазы, константы K_{φ} - определяют высоты потенциальных барьеров двухгранных углов φ.

Ван - дер - Ваальсовые взаимодействия атомов:

$$E_{LJ} = \sum_{ij \in vdW} \left[\frac{A_{ij}}{R_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{R_{ij}^{6}} \right], \quad (8)$$

где A_{ij} и B_{ij} - параметры взаимодействия;

$$A_{ij} = \left(\frac{e_i^*}{2} + \frac{e_j^*}{2} \right)^{12} \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j} ; \qquad B_{ij} = 2\left(\frac{e_i^*}{2} + \frac{e_j^*}{2} \right)^{6} \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j} ;$$

$\frac{e_i^*}{2}$ - половина минимальной энергии разделения двух атомов.

ε_i - глубина взаимодействия для i-го атома,

ε_j - глубина взаимодействия для j-го атома,

R_{ij} - расстояние, на котором происходит взаимодействие.

В работе исследование термодинамических параметров системы фуллерен – молекулы водорода проводилось по следующим формулам:

Температура системы определялась через среднюю кинетическую энергию, приходящуюся на одну степень свободы:

$$k_Б T = \frac{2K}{3n - 3}, \quad (9)$$

где $k_Б$ - константа Больцмана, а K – кинетическая энергия системы фуллерен - молекулы водорода:

$$K = \sum_{i=1}^{n} \frac{m_i V_i^2}{2}, \quad (10)$$

Давление вычислялось по следующей формуле:

$$P = \frac{1}{3W}\left[2K - \sum_{\substack{i,j \\ i<i}} (\vec{r}_{\hat{j}} - \vec{r}_i)\vec{F}_{i\hat{j}}\right] \qquad (11)$$

Здесь $\hat{j}$ означает, что наряду с j-й частицей рассматриваются также все ее образы в соседних ячейках и выбираются координаты той частицы, которая оказалась ближе всего к i-й частице; $\vec{F}_{i\hat{j}}$ - сила, действующая на i-ю частицу со стороны $\hat{j}$-й; *W*- объем расчетной ячейки [15].

Решение системы уравнений (1) осуществлялось численно по схеме Верлета, описание которой представлено в [11,12,14,15].

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Рассмотрим основные закономерности поглощения и выделения водорода фуллеренами, выявленные при численном моделировании данных процессов.

На рис. 2 приведен фуллерен C_{240} в окружении молекулярного водорода при температурах 300 (а) и 50 (б) градусов Кельвина (K^O). Видно, что в первом случае фуллерен находится в "облаке" молекулярного водорода, а во втором - покрыт плотным слоем молекул водорода (рис.2б).

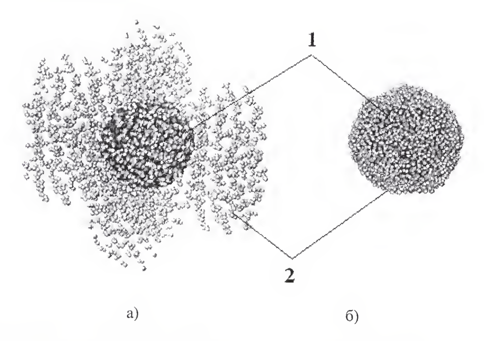


Рис. 2. Фуллерен C_{240} (1) в окружении молекулярного водорода (2)

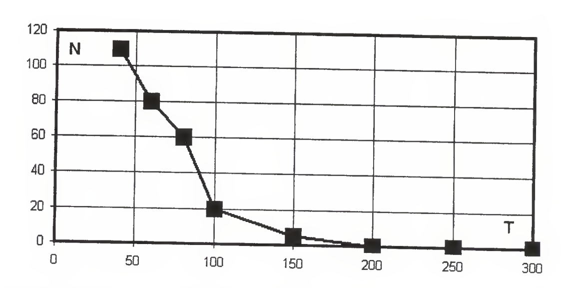


Рис. 3. Зависимость количества адсорбированных молекул водорода N от температуры T для фуллерена C180

На рис.3 представлен график зависимости количества адсорбированных молекул водорода N при различных температурах T для фуллерена C180. При моделировании использовалась ячейка с длиной ребра 50А с периодическими граничными условиями. Радиус фуллерена C180 составляет 6А. Время процесса накопления водорода составляло 500пс. Из расчетов следует, что процесс адсорбции существенно зависит от температуры. При уменьшении температуры количество молекул водорода, адсорбированных фуллереном C180, интенсивно возрастает. В диапазоне от 50 до 100 градусов Кельвина количество данных молекул возрастает в 5 раз.

Структура адсорбированного водородного облака в виде гистограмм распределения количества молекул водорода и плотности водородного облака вокруг фуллерена C180 при T=40K представлена на рис.4. и рис.5, соответственно. Из данных гистограмм видно, что молекулы водорода концентрируются в узкий внешний слой толщиной ~5 ангстрем. Минимальное расстояние между атомами углерода молекулы фуллерена и атомами молекулы водорода равно 2,4А.

Работу фуллерена C180 в качестве элементарной ячейки водородного аккумулятора, позволяющей накапливать и выделять водород, иллюстрирует рис. 6, на котором приведен график изменения содержания водорода на фуллерене C180 при переменных температурах. В течение первых 220пс температура равнялась 40K, затем увеличилась до 300K. На первом этапе происходит накопление и “стабильное” хранение водорода на фуллерене. На втором этапе (при нагреве) водород отсоединяется от фуллерена и может быть использован в качестве источника энергии.

В заключение анализа проведенных численных расчетов рассмотрим структуру водородного облака, образованного молекулами водорода вокруг фуллерита, состояще-

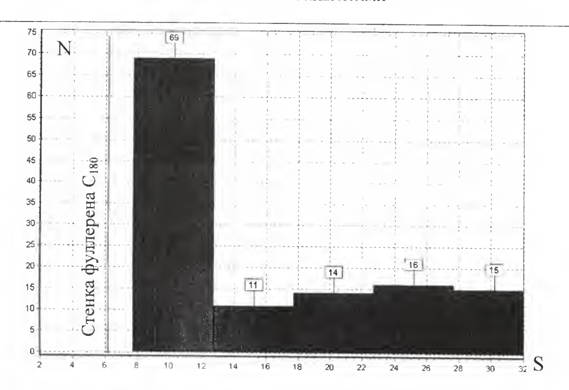


Рис. 4. Гистограмма радиального распределения молекул водорода N в зависимости от расстояния S (A) от центра фуллерена C180 при T=40K

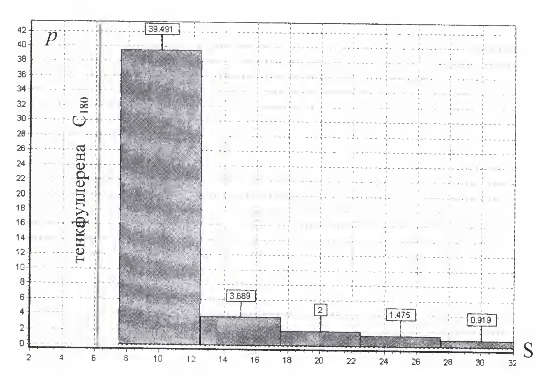


Рис. 5. Гистограмма радиального распределения плотности молекул водорода ***p*,*кг/м*^{3}** в зависимости от расстояния S, A от центра фуллерена C180 при T=40K

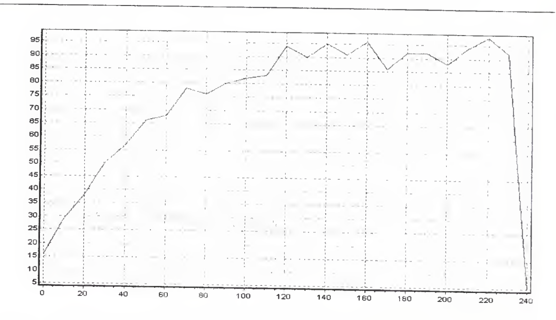


Рис. 6. График адсорбции/десорбции молекул водорода фуллереном C180 при переменных температурах

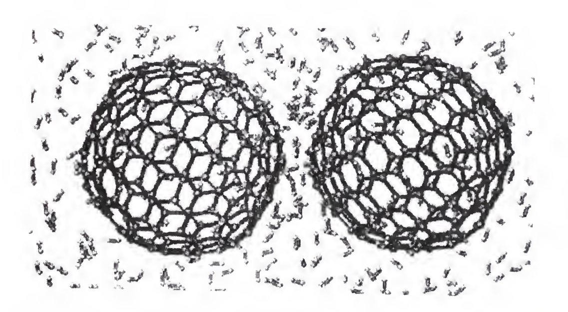


Рис.7. Структура водородного облака, образованная молекулами водорода вокруг фуллерита, состоящего из двух фуллеренов C180

го из двух фуллеренов C180 (рис.7). Как видно из данного рисунка, молекулы водорода неравномерно распределены вокруг фуллерита. Плотность водородного облака между фуллеренами намного выше его плотности в периферийной части фуллерита.

ВЫВОДЫ

Проведенные расчеты позволили выявить структуру водородных образований на фуллерене и в фуллеритах, и установить основные закономерности поглощения, хранения и выделения водорода указными наноструктурами. В целом численные исследования показывают, что фуллерены и фуллериты могут являться эффективными элементарными ячейками аккумуляторов водорода, работающих в циклическом режиме: поглощение, хранение и выделение водорода.

Работа поддержана комплексной программой фундаментальных исследований Президиума РАН № 26 «Водородная энергетика», гос. контракт № 10002-251/П-26/117-383/290404-138.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Maeland A. J. Hydrogen storage for automobile transport – survey and approbation / Institute of Energy Technology, (2000), Norway.
2. Hirscher M., Becher M., Haluska M., Quintel A., Skakalova V., Choi Y.-M., Dettlaff-Weglikowska U., Roth S., Stepanek I., Bernier P., Leonhardt A., Fink J. Hydrogen storage in carbon nanostructures // Journal of Alloys and Compounds, Vol. 330-332, 2002.- pp. 654-658.
3. Züttel A., Nützenadel Ch., Sudan P., Mauron Ph., Emmenegger Ch., Rentsch S., Schlapbach L., Weidenkaff A., Kiyobayashi T. Hydrogen sorption by carbon nanotubes and other carbon nanostructures // Journal of Alloys and Compounds, V. 330-332, 2002.- pp 676-682.
4. Seung Mi Lee, Kay Hyeok An, Young Hee Lee, Gotthard Seifert, Thomas Frauenheim Novel Mechanism of Hydrogen Storage in Carbon Nanotubes / Journal of the Korean Physical Society, Vol. 38, No. 6, June 2001.- pp. 686-691.
5. Shigeo Maruyama, Tatsuto Kimura Molecular dynamics simulation of hydrogen storage in single-walled carbon nanotubes / 2000 ASME International Mechanical Engineering Congress and Exhibit, Orland, November 5-11, 2000.
6. Deepak Srivastava, Madhu Menon, Kyeungjae Cho Nanotechnology. Computational nanotechnology with carbon nanotubes and fullerenes Computing in science & engineering / American Institute of Physics, Jul. /Aug. 2001.- pp.42-55.

7. Qinyu Wang and J. Karl Johnson Molecular simulation of hydrogen adsorption in single-walled carbon nanotubes and idealized carbon slit pores / J. of chemical physics V. 110, N. 11, 1999.-pp.577-578.
8. Суетин М.В. Численное исследование процессов поглощения, хранения и выделения водорода фуллеренами // Математическое моделирование и краевые задачи. Труды второй всероссийской научной конференции Самара, 2005.- С.234-237.
9. Вахрушев А.В., Суетин М.В. Численное исследование процессов поглощения, хранения и выделения водорода фуллеренами // Проблемы термогазодинамики и прочности механических систем. Ижевск, 2005. - С.157-167.
10. Вахрушев А.В., Липанов А.М., Суетин М.В. Численное исследование процессов поглощения и выделения водорода фуллеренами // 14-я зимняя школа по механики сплошных сред. Тезисы докладов. Пермь, 2005. - С.60.
11. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в статистической физике. – М.: Наука, 1990.-176с.
12. Романова Т. А., Краснов П.О., Качин С. В., Аврамов П. В. Теория и практика компьютерного моделирования нанообъектов: Справочное пособие / Красноярск: ИПЦ КГТУ, 2002.- 223 с.
13. Tahir Cagın, Jianwei Che, Yue Qi, Yanhua Zhou, Ersan Demiralp, Guanghua Gao, William A. Goddard III Computational materials chemistry at the nanoscale / Journal of Nanoparticle Research ,N1,1999.- p.p.51–69.
14. Verlet L. Computer "experiments" on classical fluids. I. Thermo dynamical properties of Lennard-Jones molecules// Phys. Rev.-1967.-v.159.- N1.- pp. 98-103.
15. Берлин А.А., Балабаев Н.К. Имитация свойств твёрдых тел и жидкостей методами компьютерного моделирования // Соросовский образовательный журнал .11, 1997.- С.85-92.

SUMMARY. Calculations of hydrogen adsorption, storage and desorption by fullerenes C_{20}, C_{60}, C_{80}, C_{180}, C_{240} and C_{540} are under different thermodynamic conditions are performed by molecular mechanic method. Similar investigation for fullerites created from described above types of fullerenes is performed too. Kinetic of accumulation process of hydrogen molecules is calculated. Thermodynamic parameters for stable hydrogen storage by the fullerene are established. Structures created from hydrogen molecules around fullerenes during storage process are built. Thermodynamic conditions and kinetic of hydrogen desorption from fullerenes are calculated.

УДК 532.55:621.454.3.004.82

ОЦЕНКА ГИДРАВЛИЧЕСКИХ ПОТЕРЬ В ГАЗОХОДЕ ПРИ СЖИГАНИИ ТВЕРДОТОПЛИВНЫХ ЗАРЯДОВ

В.А. КАРЕЛИН, В.Ю. МЕЛЕШКО, В.С. ШУСТАЧИНСКИЙ, В.М.АТАМАНЮК

Военная академия РВСН имени Петра Великого, Москва, Россия

АННОТАЦИЯ. Для стенда сжигания при пониженном давлении твердотопливных зарядов снимаемых с вооружения ракет проведены расчеты для определения гидравлических потерь в газоходе при впрыске охладителя и раствора нейтрализатора. Показано влияние скорости впрыска, расхода и угла наклона струи охладителя на гидравлические потери.

Одним из возможных путей решения проблемы ликвидации твердотопливных зарядов снимаемых с вооружения ракет является создание стендов для их сжигания при пониженном давлении (без соплового блока). Качественное проектирование и строительство такого стенда невозможно без соответствующего научно-технического сопровождения, обеспечивающего оптимизацию конструкции и основных технологических параметров стендового оборудования. Имеющийся к настоящему времени опыт сжигания твердотопливных зарядов не позволяет оптимизировать технологические параметры истечения горячих турбулентных струй продуктов сгорания из камеры двигателя в газоход с целью обеспечения высокого уровня технической и экологической безопасности. В связи с этим представлялось целесообразным в качестве одного из этапов предварительных работ оценить гидравлические потери в газоходе.

Элементами, создающими гидравлические потери в газоходе, являются:

- расширение струи от отверстия в корпусе РДТТ до канала газохода диаметром 4,5 м;
- впрыск охладителя через отверстия на периферии стенки; введение дополнительной массы со своим расходом и своей ориентацией относительно направления течения газа вызывает потери импульса на ускорение этой массы и, соответственно, потери давления;
- впрыск водного раствора нейтрализатора, который действует на потери давления аналогично впрыску охладителя.

Расчет потерь при внезапном расширении струи и новых параметров потока в газоходе был выполнен по аналогии с примером Г.Н.Абрамовича по расчету потерь

давления на мерном сопле в дозвуковом трубном течении [1]. В соответствии с этим приведенная скорость $\lambda_{гх}$ в газоходе находится из уравнения:

$$z(\lambda_{гх}) = z(\lambda_c) + \left(\frac{\kappa+1}{2}\right)^{\frac{1}{k-1}} \frac{1}{y(\lambda_c)}\left(\frac{F_{гх}}{F_c} - 1\right),$$

где $z(\lambda_{гх})$, $z(\lambda_c)$, $y(\lambda_c)$ - газодинамические функции соответствующих приведенных скоростей.

После подстановки значений газодинамических функций приведенной скорости λ_c=0,604, κ=1,33, $z(\lambda)=\lambda+1/\lambda$ = 1,6556 и $y(\lambda)$=1,0043 (табличное значение) и отношения площадей поперечных сечений газохода и сопла $F_{гх}/F_c$=15,9/0,4864 =32,7 получили $z(\lambda_{гх})$=52,38. Значение $\lambda_{гх}$=0,02 было получено в результате решения квадратного уравнения газодинамической функции.

Относительные потери полного давления при внезапном расширении дозвукового потока были найдены по зависимости

$$\sigma = \frac{P^*_{гх}}{P^*_c} = \frac{F_c}{F_{гх}} \frac{q(\lambda_c)}{q(\lambda_{гх})},$$

где $q(\lambda)$ – табличная газодинамическая функция.

Подстановкой в эту зависимость значений функции для приведенных скоростей в сопле и газоходе получили σ=0,7824. Если полное давление на срезе P_c=0,128 МПа, то после зоны рециркуляции газоходе оно составит $P_{гх1}$=0,128.0,7824=0,10015 МПа, а средняя скорость после зоны рециркуляции $w\approx$20 м/с.

Длина зоны рециркуляции при внезапном расширении турбулентной струи принята, как в случае эжектора, равной длине, при которой расширяющаяся струя касается стенок газохода. Если угол расширения струи диаметром 0,787 м составляет 28-30°, а диаметр ограничивающего канала равен 4,5 м, то струя будет касаться стенок на расстоянии ~7 м. Разрежение в зоне рециркуляции будет сокращать ее длину.

Расчет потерь давления при подводе массы охладителя проводили с учетом относительного расхода охладителя $m^*_{ох} = m_{ох}/m_г$, а также ориентации и скорости струй охладителя, характеризуемых параметром

$$k=(w_{ох}\cdot\cos\alpha)/w_г,$$

где α- угол между направлением впрыска охладителя и направлением потока газа в газоходе.

Относительные потери давления находили по зависимости [2] $\sigma_{см}=2m^*_{ох}(2+m^*_{ох}-k)$, полученной из рассмотрения процесса втекания вторичной среды

в канал, элемент которого представлен на рис.1. Сносящий поток в канале до смешения с втекающими струями движется со скоростью $w_г$. В сечении 1-1 в канал вводятся струи вторичной среды, имеющие горизонтальную составляющую скорости $w'_{ox}=w_{ox}\cos\alpha$. Вертикальная составляющая скорости втекающей струи, т.е. величина, пропорциональная расходу через отверстия m_{ox} будет зависеть от перепада давлений на форсунках, при котором происходит истечение. В некотором сечении II скорости сред выравняются и приобретут среднее значение $w_{г2}$.

Для выделенного элемента канала (рис.1) уравнение количества движения запишется в виде

$$F\left(p_{г1}-p_{г2}\right)=m_{г2}w_{г2}-\left(m_{г1}w_{г1}+m_{ox}w'_{ox}\right).$$

Следует заметить, что:

$$m_{г2}=m_{г1}+m_{ox}=m_{г1}(1+m^*_{ox});$$

$$w_{г2}=w_{г1}(1+m^*_{ox});$$

$$m_{г1}=w_{г1}\rho_г F$$

После подстановки этих обозначений в уравнение количества движения и элементарных преобразований было получено выражение для потерь давления на выделенном элементе канала в виде:

$$\Delta p_{1-2}=\frac{\rho^2_{г1}}{2}\left[2m^*_{ox}\left(2+m^*_{ox}-k\right)\right]$$

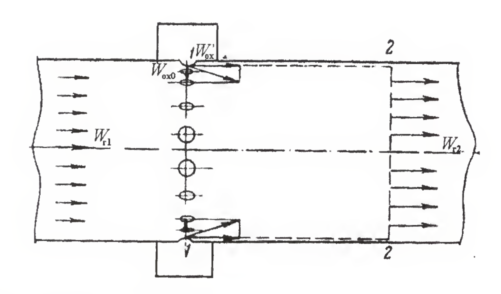


Рис. 1. Схема элемента канала газохода

или в виде коэффициента относительных потерь статического давления $\sigma_{см}=\Delta p_{1-2} /(\rho w_{г1}^2/2)$ на рассматриваемом участке в долях скоростного напора сносящего потока. Коэффициент потерь статического давления может иметь как положительные, так и отрицательные значения в зависимости от соотношения величин k и $m^*_{ох}$. Если k=0, т.е. втекающие струи не имеют горизонтальной составляющей скорости, то на разгон втекающих струй до скорости $w_{г2}$ сносящий поток затратит часть своей энергии и статическое давление газа в сечении 2-2 будет меньшим, чем в сечении 1. В этом случае при любых соотношениях расходов охладителя и газа $m^*_{ох}$ коэффициент потерь статического давления будет иметь положительное значение, быстро возрастающее с увеличением относительного расхода охладителя (пример из [2] на рис.2). Если горизонтальная составляющая скорости втекающей среды $w'_{ох}$ превышает скорость сносящего потока $w_{г1}$ более чем в два раза, напр. k=2,5, то до значения $m^*_{ох}$=0,5 коэффициент потерь статического давления будет иметь отрицательное значение, при $m^*_{ох}$=0,5 этот коэффициент $\sigma_{см}$=0 и при $m^*_{ох}$>0,5 относительные потери давления примут положительные значения.

При втекании струй в сносящий поток будут иметь место потери полного напора на смешение, что следует из уравнения Бернулли:

$$\Delta p^* = (p_1 - p_2) + \frac{\rho w_{г1}^2}{2} - \frac{\rho w_{г2}^2}{2} .$$

С учетом того, что $w_{г2}= w_{г1}(1+ m^*_{ох})$ и

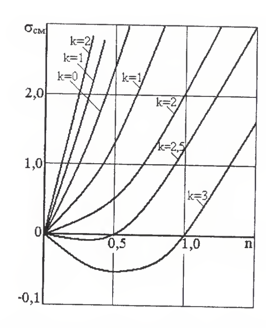


Рис.2. Влияние k и $n\equiv m_{ох}$ на коэффициент потерь статического давления $\sigma_{см}$ [2]

$$p_1 - p_2 = \frac{\rho w_{г1}^2}{2}\left[2m_{ox}^*\left(2 + m_{ox}^* - k\right)\right],$$

после соответствующих подстановок получим:

$$\Delta p^* = \frac{\rho w_{г1}^2}{2}\left[\ \left(m_{ox}^*\right)^2 + 2m_{ox}^* - 2m_{ox}^* k\ \right].$$

Семейство кривых $\sigma^*_{см}$ имеет качественно тот же характер, что и семейство кривых коэффициента потерь статического давления.

При значениях k от нуля до единицы и при всех значениях m^*_{ox} полный напор сносящего потока падает, так как этот поток затрачивает энергию на разгон струи. При значениях k>1 и малых значениях m^*_{ox} имеются области, где величина полного напора увеличивается ($\sigma^*_{см}$<0) за счет разгона сносящего потока втекающими струями; однако при дальнейшем увеличении m^*_{ox} значение $\sigma^*_{см}$ переходит через ноль и становится снова положительным. Здесь потери энергии полного напора в сносящем потоке на поворот струй и перемешивание превосходит увеличение энергии за счет горизонтальных составляющих втекающих струй, разгоняющих сносящий поток.

Эти результаты получены в предположении, что компактные струи охлаждающей воды при поступлении в канал превращаются в пар той же самой плотности, что и газ. Для рассмотренной задачи в интегральной постановке не имело значения число форсунок, их диаметр и перепад давлений на них. Также не учитывались потери давления на обтекание газом решетки из струй в поперечном сечении канала газохода.

Результаты расчетов приведены в табл.1 для возможных случаев ввода воды с различными скоростями и под различными углами к оси канала на относительные потери статического давления.

Принятые модули (отношения расходов воды к расходу газа) ввода охладителя на уровне 12-15 отражают опыт работы в основном на модельных конструкциях, причем без анализа к.п.д. использования воды. В этих экспериментах выброс капельно-жидкой воды из модельных газоходов не учитывался.

Если известна термодинамическая энтальпия продуктов сгорания сжигаемого топлива, то за модуль в качестве исходной величины может быть принято значение

$$m_{ox} = H_{TT}/H_{исп}$$

где $H_{исп}$ - теплота испарения воды 2,26 МДж/кг при 100°С;

H_{TT} - энтальпия продуктов сгорания.

Если H_{TT} находится на уровне 25 МДж/кг, то в первом приближении

$$m_{ox}=25:2{,}26=11{,}06 \text{ кг воды на 1 кг газа.}$$

Таблица 1. Относительные потери давления, вызванные вводом массы охладителя

Скорость впрыска, м/с	m^*_{ox}	$\sigma_{см}$ при угле отклонения потока от оси газохода, град						$\sigma^*_{см}$ при α=90°
		15	30	45	60	75	90	
100	2	-3,316	-1,32	1,858	6,0	10,82	16	8
	4	9,368	13,36	19,72	28	37,65	48	24
	8	82,736	90,72	103,44	120	139,3	160	80
	10	143,42	153,4	169,3	190	214,1	240	120
50	2	6,341	7,34	8,929	11,0	13,41	16	8
	4	28,682	30,68	33,86	38,0	42,82	48	24
	6	67,023	70,02	74,79	81,0	88,24	96	48
	8	121,36	125,36	131,72	140,0	149,65	160	80
	10	151,71	196,7	204,65	215,0	227,1	240	120
10	2	14,068	14,268	14,58	15,0	15,48	16	8
	4	44,14	44,54	45,17	46,0	46,96	48	24
	6	90,20	90,80	91,76	93,0	94,45	96	48
	8	152,27	153,1	154,34	156,0	157,93	160	80
	10	230,34	231,3	232,93	235,0	237,41	240	120

Если учесть удельную теплоемкость капельно-жидкой воды при нагреве ее от 20°C до расчетной температуры охлаждения газа, то

$$m_{ox} = \frac{H_{TT}}{H_{исп} + c_p\left(T_{расч} - T_0\right)}$$

Учитывая, что удельная теплоемкость воды составляет около 4 кДж/кг·K, величина поправки может составить около 10%. Введение в этот насыщенный водяной пар с небольшой примесью газа дополнительно водного раствора нейтрализатора приведет к выпадению капель воды.

Ввод охлаждающей жидкости (воды) в газоход с большим поперечным сечением предпочтительно осуществлять компактными струями достаточно большого диаметра с тем, чтобы потери массы струй из-за испарения и разбрызгивания вследствие гидродинамической неустойчивости были равномерными по достаточно большой длине струи,

соизмеримой с радиусом газохода.

Можно предположить, что в высокотемпературном газовом потоке теплообмен струи с газом будет осуществляться вынужденной конвекцией в режиме пленочного охлаждения (нагрева), когда тепло- и массообмен происходят через паровую пленку. В этом случае критический удельный тепловой поток (первая критическая плотность теплового потока) для воды составляет 0,7-1,2 МДж/м^{2}с [3]. Если поглощаемый тепловой поток расходуется только на парообразование с образованием потока массы с поверхности струи, то изменение по времени поперечного сечения элемента струи, движущегося со скоростью w_{ox}, можно описать уравнением

$$\frac{\rho dV(t)}{dt} = S(t)\frac{q_{кр}}{H_{исп}}.$$

Так как $V=\pi R^2 y$, $dV = 2\pi R(t)dRy$ и $S(t) = 2\pi R(t)y$, то

$$-\frac{dR}{dt} = \frac{q_{крит}}{H_{исп}}\frac{1}{\rho}, \text{ м/с или } R_0 - R = \frac{q_{крит}}{H_{исп}}\frac{1}{\rho}t.$$

Поскольку струя движется с постоянной скоростью, то изменение радиуса струи по длине можно выразить

$$R = R_0 - \frac{q_{крит}}{H_{исп}}\frac{1}{\rho w}x, \text{ м.}$$

Дальнобойность такой струи (без учета изгиба сносящим потоком и разбрызгивания) будет равна

$$l = \frac{R_0 H_{исп} \rho w_{ox}}{q_{крит}}, \text{ м}$$

Если начальный радиус R_0 = 1 см, теплота испарения воды 2,26 МДж/кг, плотность воды 1000 кг/м^3, скорость струи 100 м/с, то длина струи составит 2,26 м, т.е. практически достигнет оси канала газохода. При принятом в проекте перепаде давлений на форсунках 0,5МПа начальная скорость струи в лучшем случае составит около 30 м/с и дальность действия струй диаметром 20 мм ограничится пристеночной зоной толщиной около 70 см. Насколько известно, такие крупные форсунки в проекте не предусмотрены, а при использовании форсунок диаметром 10 мм толщина пристеночной зоны ограничится 35 см.

В любом случае, за зоной впрыска охладителя должна располагаться буферная зона для выравнивания состава парогаза. Лучшие условия для перемешивания будут в случае использования дальнобойных и наклонных струй, чем струй, направленных по нормали к оси канала газохода.

В зоне ввода нейтрализатора форсунки ввода могут быть расположены по поперечному сечению канала газохода, а не только по периферии, поскольку температура парогаза уже низкая.

Из материального баланса следует, что расчетное начальное давление воды на орошение на входе в газоход составляет 0,5 МПа, а конечное – 0,2 МПа. Это означает, что расход воды на орошение в течение 150с (за время сгорания заряда) падает в $\sqrt{\frac{0,5}{0,2}} = \sqrt{2,5} = 1,58$ раза, т.е. вместо заданного значения 2000 кг/с в конце прожига в газоход будет поступать 1266 кг/с. Таким образом, заведомо создается высокая вероятность проскока необработанных продуктов сгорания в сепаратор. Этот проскок будет возрастать с увеличением времени прожига в силу каких-либо причин, например, вследствие снижения давления в камере сгорания. Этот недостаток обусловлен принятой вытеснительной системой подачи воды для орошения с использованием воздушного аккумулятора давления без стабилизатора расхода воздуха. Расчеты параметров газа в емкости при ее опорожнении в различных случаях, в т.ч. и в динамике, можно найти в книге [4].

Из материального баланса также следует, что камера сгорания работает при давлении 1 МПа, что повышает скорость горения по сравнению с атмосферными условиями. При этом поджатие камеры осуществляется за счет гидравлических сопротивлений газохода, которые будут изменяться в зависимости от модуля m^*_{ox}. Снижение модуля к концу прожига приведет к снижению гидравлических потерь, снижению давления в камере, уменьшению скорости горения и увеличению времени прожига, т.е. опять к снижению модуля.

Применение давления в газоходе выше атмосферного давления будет вызывать утечки необработанных продуктов сгорания через любые щели. В идеале, в газоходе должно поддерживаться давление ниже атмосферного.

Принятая концентрация вводимого раствора нейтрализатора (10%-ного раствора каустической соды) представляется недостаточно оправданной. Это значение является общепринятым для нейтрализации газов, в которых вода практически отсутствует и на поверхности капель возможно образование слоя продуктов нейтрализации. В данном же случае парогаз имеет более чем 7-кратное содержание воды виде насыщенного пара и мелкодисперсных капель (тумана). Поэтому концентрация каустической соды может быть увеличена по меньшей мере вдвое и за счет этого может быть сокращено потребление воды до 10%. При поступлении капель нейтрализатора в объем парогаза они будут насыщаться влагой за счет диффузии и концентрация будет убывать. Ухудшение

условий распыления форсунками при увеличении концентрации щелочи вряд ли будет наблюдаться, поскольку вязкость раствора при 20°С с 10% масс. NaOH составляет 1,86 сП (как вода при 0°С), а с 20% - 4,48 сП, что сравнимо с вязкостью анилина при этой температуре [5].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абрамович Г.Н. Прикладная газовая динамика. –М.: Наука, 1976. 888 с.
2. Михайлов А.И., Горбунов Г.М., Борисов В.В. и др. Рабочий процесс и расчет камер сгорания газотурбинных двигателей. -М.: Оборонгиз, 1959. 285 с.
3. Кутателадзе С.С. Основы теории теплообмена. М-Л.: Машгиз, 1957. 383 с.
4. Беляев Н.М., Белик Н.П., Уваров Е.И. Реактивные системы управления космических летательных аппаратов. -М.: Машиностроение, 1979. 232 с.
5. Краткий справочник физико-химических величин. Под ред. Мищенко К.П., Равделя А.А. -Л.: Химия, 1967. 182 с.

SUMMARY. An estimation of resistance head for test bench of low pressure combustion of solid propellant charge of annihilable rockets is done. The influence of inlet velocity, consumption of water and jet tilt angle on resistance head is shown.

РЕФЕРАТЫ

УДК539.3:621.454.3

Напряженно-деформированное состояние зарядов РДТТ в области донного торца. Дунаев В.А., Каширкин А.А., Евланова О.А. ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ. 2005. Т. 7. №3. С. 237-242.

Разработана комплексная математическая модель, содержащая модели одномерного квазистационарного течения, двумерного течения газов в области торцов заряда и напряженно-деформированное состояние заряда. На основе данной модели проведен анализ движения потоков продуктов сгорания в области у переднего днища и напряженно-деформированного состояния донного торца заряда. Ил. 2. Библиогр. 5.

УДК 621.454.3

Баллистические характеристики активно-реактивных снарядов с применением композиционных материалов и надежность их маршевых ракетных двигателей. Александров Д.П., Захаренков В.Ф. ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ. 2005. Т. 7. №3. С. 243-250.

Изложен машинный эксперимент по изучению влияния механических характеристик твердого топлива и материалов корпусов маршевых ракетных двигателей на твердом топливе (РДТТ) при замене металлических корпусов на стеклопластиковые и боралюмоуглепластиковые на боевую эффективность активно-реактивных снарядов (АРС) и надежность их функционирования. Даны статистический анализ работоспособности РДТТ и рекомендации по повышению технических характеристик изделий. Табл. 2. Ил. 4. Библиогр. 4.

УДК 539.3:623.4

Исследование взаимодействия комбинированных ударников с преградами. Глазырин В.П., Орлов Ю.Н., Орлов М.Ю. ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ. 2005. Т. 7. №3. С. 251-258.

Разработана методика компьютерного моделирования взаимодействия ударников с преградами из различных конструкционных материалов. Спрогнозированы результаты взаимодействия, а также выявлено влияние материалов сердечников на пробивное действие ударников. Установлено, что за счет изменения компоновки и формы ударника для дозвуковой скорости взаимодействия можно существенно увеличить его пробивное действие. Табл. 3. Ил.4. Библиогр. 5.

УДК 677-486.1

Особенности поведения углерод-углеродных материалов при ударно-волновом нагружении. Апакидзе Ю.В., Тихонов А.А., Уткин А.В., Гафаров Б.Р. ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ. 2005. Т. 7. №3. С. 259-265.

Приведены результаты экспериментальных исследований поведений углерод-углеродных материалов при ударно-волновом нагружении. Полученные результаты показывают высокую чувствительность структуры фронта ударных волн и откольной прочности к структуре композиционных материалов. Ил. 4. Библиогр. 8.

УДК 623.4.017

Термоэрозионная и механическая стойкость стволов артиллерийских автоматов. Александров Д.П., Захаренков В.Ф., Цепелев В.С. ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ. 2005. Т. 7. №3. С. 266-276.

Приводится математическое описание модели термоэррозионной и механической стойкости стволов артиллерийских автоматов в условиях стрельбы короткими или длинными очередями с темпом стрельбы 600 выстр./мин. Комплексная математическая модель включает описание процессов внутренней баллистики, теплообмена, теплопроводности и износа с учетом структурно-фазовых превращений в материале орудийной стали, а также механических и температурных напряжений 1-го и 2-го рода, возникающих при циклическом высокоимпульсном тепловом нагружении. Результаты численных исследований по разработанной модели иллюстрируются примером расчетов 30-мм гипотетической автоматической пушки, имеющей начальную скорость снаряда 960 м/с и максимальное давление 380 МПа. Ствол изготовлен из орудийной стали 38ХНМФА. Ил. 10. Библиогр. 10.

УДК 539.2: 539.3

Методика расчета упругих параметров наноэлементов. Вахрушев А.В., Шушков А.А. ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ. 2005. Т.7. №3. С. 277-285.

Разработана методика расчета упругих констант нано элементов методом согласования перемещений составляющих их атомов с полями перемещений упругих “эквивалентных” элементов при различных видах нагружения. Приведены результаты расчетов модуля упругости наночастиц, нагруженных растягивающими сосредоточенными силами. Получены расчетные зависимости модуля упругости Юнга от диаметра наночастиц. Ил.7. Библиогр.14.

УДК 532.519.6

Численное исследование течений жидкости с переменными вязкими свойствами в изогнутых каналах. Вахрушев А.А., Липанов А.М., Вахрушев А.В. ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ. 2005. Т.7. №3. С. 286-300.

Рассмотрена задача моделирования двумерных течений неньютоновских жидкостей в криволинейных каналах. Проведены численные расчеты параметров псевдопластической среды, описываемой с помощью реологической модели Пауэлла - Эйринга, и исследованы физические явления, возникающие при локальном изменении температуры стенки канала. Ил. 6. Библиогр. 8.

УДК 539.3:621.454.3.004.82

О критерии безопасного сжигания дефектных зарядов твердого топлива при пониженных давлениях. Поспелов Д.А., Мелешко В.Ю., Наумов П.Н., Павловец Г.Я. ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ. 2005. Т.7. №3. С. 301-308.

Рассмотрены дефекты твердотопливных зарядов снимаемых с вооружения ракет, влияющие на процесс сжигания. Предложены критерии, позволяющие оценить влияние дефектов заряда на увеличение поверхности горения и расхода продуктов сгорания. Определены условия, при которых растрескивание внутренней поверхности заряда можно считать не опасным для его утилизации. Библиогр. 3.

УДК 539.2: 544.723

Моделирования процессов поглощения и выделения водорода фуллеренами и фуллеритами. Липанов А.М., Вахрушев А.В., М.В.Суетин, А.А. Вахрушев ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ. 2005. Т.7. № 3. С. 309-318.

Методом молекулярной динамики выполнены расчеты адсорбции, хранения и выделения водорода фуллеренами C_{20}, C_{60}, C_{80}, C_{180}, C_{240} и C_{540} и сформированными из фуллеритами при различных внешних условиях. Рассчитаны кинетика адсорбции молекул водорода фуллеренами; определены термодинамические параметры, необходимые для устойчивого хранения водорода фуллереном; построена структура, образованная молекулами водорода на фуллерене при хранении; определены термодинамические условия выделения водорода. Ил.7. Библиогр.15.

УДК 532.55:621.454.3.004.82

Оценка гидравлических потерь в газоходе при сжигании твердотопливных зарядов. Карелин В.А., Мелешко В.Ю., Шустачинский В.С., Атаманюк В.М. ХИМИЧЕСКАЯ ФИЗИКА И МЕЗОСКОПИЯ. 2005. Т.7. №3. С. 319-327.

Для стенда сжигания при пониженном давлении твердотопливных зарядов снимаемых с вооружения ракет проведены расчеты для определения гидравлических потерь в газоходе при впрыске охладителя и раствора нейтрализатора. Показано влияние скорости впрыска, расхода и угла наклона струи охладителя на гидравлические потери. Табл. 1. Ил. 2. Библтогр. 5.

